

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

587.311.33

**ВОПРОСЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕОРИИ  
НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ****В. Л. Бонч-Бруевич****СОДЕРЖАНИЕ**

Введение . . . . .	583
I. Природа электронных состояний в неупорядоченных полупроводниках различной размерности . . . . .	584
1. Введение. Критерий локализации (584). 2. Масштабная теория локализации. (588). 3. Предельные формы функции $\beta(g)$ . Термические и неомические эффекты (591). 4. Качественное исследование уравнения (2.7). Локализация состояний при $d = 1, 2$ (594). 5. Проблема минимальной металлической проводимости ( $d = 3$ ) (596). 6. Степенная локализация в двумерной системе (601).	
II. Многоэлектронные эффекты в физике неупорядоченных систем . . . . .	606
7. Введение (606). 8. Взаимодействие между делокализованными электронами или только рассеяние на примеси (606)? 9. Проблема кулоновской щели (608).	
III. «Хвост» коэффициента междузонного поглощения света в неупорядоченном полупроводнике . . . . .	613
10. Введение (613). 11. Фононы и статический беспорядок (614). 12. Случайное поле и правило Урбаха (618). 13. Правило Урбаха в аморфном кремнии (621).	
Приложения . . . . .	625
I. Поправки к результатам кинетического уравнения при $T \rightarrow 0$ (625). II. О роли температурной зависимости плотности состояний при низких температурах (627).	
Цитированная литература . . . . .	632

**ВВЕДЕНИЕ**

Физика неупорядоченных систем — аморфных и стеклообразных полупроводников, аморфных магнетиков, металлических и неметаллических сплавов и др. — пользуется сейчас повышенным вниманием. Как часто бывает в подобных случаях, тому есть две причины. Одна из них связана с внутренней логикой развития науки — для современного этапа развития физики конденсированной среды характерен переход от кристаллических материалов к веществам, в атомной структуре которых дальний порядок отсутствует. Другая причина обусловлена потребностями современной электроники. После того как Б. Т. Коломийцем и Н. А. Горюновой<sup>1,2</sup> были открыты полупроводниковые свойства халькогенидных стекол, фотоэлектроника получила в свое распоряжение новый класс весьма интересных материалов, практическая ценность которых ныне общеизвестна. В последние годы на первый план выдвинулся аморфный кремний (особенно — сплавы его с водородом или фтором). Благодаря своим уникальным характеристикам (удобная ширина запрещенной зоны, большое темновое сопротивление и большое время жизни неравновесных носителей заряда)

этот материал, по-видимому, весьма перспективен для приложений в ряде фотоэлектрических устройств, включая солнечные батареи. На девятой Международной конференции по аморфным и жидким полупроводникам (Гренобль, июль 1981 г.) половина всех докладов была посвящена разным аспектам физики, технологии и использования этого материала.

В последние годы был опубликован ряд обзорных работ, посвященных как фундаментальным, так и прикладным аспектам физики неупорядоченных полупроводников<sup>3-22</sup>. Темп развития этого раздела физики, однако, таков, что ни один обзор за ним не поспевает. В результате появляются новые обзоры; они делят судьбу предыдущих, и пока неясно, сходятся ли этот ряд вообще.

Настоящий обзор рассчитан более на экспериментаторов, чем на теоретиков. В известной мере он может служить дополнением к вышедшей в свет в 1981 г., но еще в 1978 г. сданной в печать книге<sup>23</sup>. В соответствии со стилем этого учебного пособия список журнальной литературы и здесь не претендует на полноту; ссылки на оригинальные работы, поскольку они не носят существенно приоритетного характера, даются лишь в ограниченном количестве, а ссылки на обзоры охватывают в основном лишь работы, вышедшие в свет не ранее 1977 г. \*).

Мы рассматриваем три вопроса, привлекавшие к себе в последнее время большое внимание.

1) Природа электронных состояний в неупорядоченных полупроводниках различной размерности (проблема локализации) \*\*).

2) Роль межэлектронного взаимодействия в формировании энергетического спектра электронов (проблема кулоновской щели).

3) Частотная зависимость коэффициента поглощения света на «хвосте» — в области энергий квантов, меньших ширины запрещенной зоны.

Первый из указанных вопросов — сравнительно новый, второй имеет уже довольно большой стаж (около 11 лет), но до сих пор служит предметом дискуссии, третий — в последнее время вновь стал очень актуальным в связи с экспериментальными исследованиями аморфного кремния.

## 1. ПРИРОДА ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ РАЗЛИЧНОЙ РАЗМЕРНОСТИ

### 1. Введение. К р и т е р и й л о к а л и з а ц и и

Конденсированную систему частиц имеет смысл назвать  $d$ -мерной ( $d = 1, 2, 3$ ), если в интересующих нас условиях электроны, дырки или другие элементарные возбуждения могут свободно перемещаться в  $d$  измерениях. Таким образом, например, органические кристаллы на основе столь модной ныне TCNQ суть системы одномерные, а инверсионный слой, возникающий у поверхности полупроводника, при достаточно большом искривлении зон становится системой двумерной. Отсюда явствует, что исследование поведения элементарных возбуждений (в дальнейшем мы будем говорить только об электронах и дырках) в системах различной размерности представляет отнюдь не только абстрактно-теоретический ин-

\*) *Примечание при редакционной подготовке рукописи к печати* (январь 1983 г.). Как и следовало ожидать, с того времени, как этот обзор был направлен в редакцию, появилось еще немало работ на ту же тему. Даже краткие аннотации их заметно расширили бы рамки и без того разросшегося обзора. Некоторые ссылки все же делаются в соответствующем месте обзора (п. 2).

\*\*) Этому вопросу был посвящен интересный обзор<sup>3</sup>. Однако он рассчитан в основном на теоретиков; сверх того, со времени его появления прошло уже больше двух лет...

терес. К этой задаче сводится, в частности, вопрос о том, как повлияет разупорядочение, вызванное, например, облучением, на характеристики тонкопленочных приборов.

Энергетический спектр электронов и дырок в слаболегированных \*) трехмерных кристаллических полупроводниках хорошо изучен: мы имеем здесь две области непрерывного спектра — зоны проводимости и дырочную — и разделяющую их запрещенную зону, в которой дозволены лишь отдельные дискретные уровни, связанные с примесями. Областям непрерывного спектра отвечают делокализованные волновые функции — вероятность обнаружить электрон (дырку) в любой элементарной ячейке кристалла отлична от нуля и одинакова во всех ячейках. Состояния непрерывного спектра — токовые: электроны и дырки, их занимающие, могут участвовать в переносе заряда и энергии при сколь угодно малых температурах и в отсутствие подсветки. С другой стороны, дискретным уровням принадлежат волновые функции, локализованные около соответствующих (беспорядочно расположенных) атомов примеси. Состояния дискретного спектра в образце сколь угодно большого размера (макроскопическом) — нетоковые: электроны (дырки), их занимающие, могут участвовать в переносе заряда и энергии через весь макроскопический образец лишь при наличии тепловой или оптической активации (прыжковая проводимость). При  $T \rightarrow 0$  и в отсутствие подсветки вклад локализованных электронов в потоки заряда и энергии исчезает.

При повышении концентрации примеси картина энергетического спектра в запрещенной зоне усложняется. Однако деление на области непрерывного и дискретного спектра, которым соответствуют токовые и нетоковые состояния, остается в силе и здесь (<sup>23</sup>, гл. IV).

Эти результаты, вытекающие из большой совокупности экспериментальных данных по электрическим и оптическим свойствам вещества, естественно получаются в электронной теории кристаллов. При этом последнюю отнюдь не обязательно формулировать как одноэлектронную: высказанные выше утверждения имеют и точный многоэлектронный смысл (<sup>24</sup>, гл. XVII). Вывод о зонной структуре спектра остается в силе и для идеальных кристаллов низшей размерности.

Ситуация, однако, меняется, коль скоро мы переходим к реальным кристаллам с примесями, беспорядочно расположенными в пространстве, и тем более к аморфным, жидким или стеклообразным полупроводникам. При  $d = 3$  картина энергетического спектра здесь все еще в известной мере сходна с той, что имеет место в кристаллах. Действительно, экспериментальные данные <sup>25,23</sup> неопровержимо свидетельствуют о наличии в трехмерных неупорядоченных полупроводниках областей непрерывного спектра электронов и дырок, которым соответствуют токовые состояния. Эти области аналогичны зонам проводимости и дырочной (часто их так и называют), но, в отличие от идеальных или почти идеальных кристаллов, здесь нельзя говорить о законах дисперсии электронов и дырок: в отсутствие пространственной периодичности в расположении атомов компоненты квазиимпульса нельзя ввести как «хорошие» квантовые числа. Между зонами проводимости и валентной имеется область, занятая дискретными уровнями, которым отвечают нетоковые состояния электронов и дырок. В отличие от слаболегированных кристаллов, однако, эти уровни могут быть расположены сколь угодно близко друг к другу по энергии (всюду

\*) Термин «слаболегированные» понимается в смысле, указанном в книге <sup>24</sup>. Слово «примесь» может обозначать любой точечный дефект структуры. Мы не касаемся здесь вопросов, связанных с протяженными дефектами, дабы не усложнять изложение деталями, для дальнейшего не существенными.

плотный дискретный спектр \*)). По этой причине распределение их по энергиям удобно характеризовать непрерывной функцией — плотностью состояний,  $\rho(E)$ , указывающей среднее число таких уровней в единице объема и в единичном интервале энергии около данной точки  $E$  (согласно <sup>23</sup> это есть усредненная по всем конфигурациям случайного поля сглаженная плотность состояний). В неупорядоченных материалах (в отличие от идеальных или почти идеальных кристаллов) плотность состояний не обращается в нуль на границах зон проводимости и валентной, а простирается довольно глубоко в запрещенную зону, образуя «хвосты» (впервые изученные в теории сильнолегированных полупроводников; см. <sup>24</sup>, гл. XIX).

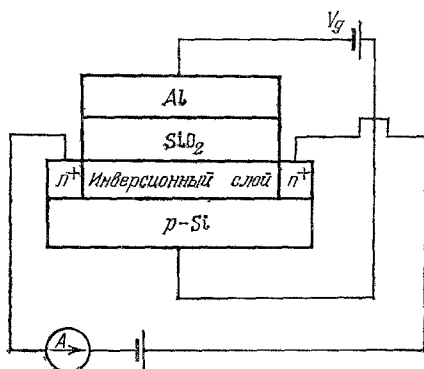


Рис. 1. Стандартная схема опыта по измерению электропроводности инверсионного слоя.

Напряжение  $V_g$  управляет положением уровня Ферми в полупроводнике

В такой ситуации сам термин «запрещенная зона» становится не совсем удобным; вместо этого часто говорят о «щели для подвижности», а дно зоны проводимости  $E = E_c$  и потолок валентной зоны  $E = E_v$  именуют порогами подвижности.

Причина возникновения «хвостов» плотности состояний хорошо известна. Дело в том, что случайный характер расположения атомов (атомов примеси или, в случае аморфных, жидких и стеклообразных полупроводников, атомов основного вещества) приводит и к случайному характеру потенциальной энергии электронов. В частности, возникают и потенциальные ямы различной глубины и формы, которым соответствуют локальные уровни различной энергии. Такие уровни называют флуктуационными. Нетривиальная особенность системы состоит в том, что эти уровни остаются дискретными, несмотря на, может быть, большую их концентрацию. Об этом говорят как об андерсоновской локализации <sup>26</sup>.

Отличие плотности состояний от нуля на пороге подвижности приводит к постановке вопроса о том, как ведет себя статическая проводимость образца,  $\sigma$  (при  $T \rightarrow 0$ ), когда уровень Ферми,  $F$ , приближается к порогу подвижности со стороны непрерывного спектра.

Этот вопрос носит отнюдь не абстрактный характер, ибо положением уровня Ферми при заданной температуре можно управлять, варьируя, например, напряжение  $V_g$  на затворе полевого транзистора (рис. 1). На рис. 1 обозначен металл (например, алюминий); вместо двуокиси кремния может фигурировать и другой диэлектрик.

В принципе здесь имеются возможности, схематически изображенные на рис. 2, а — в: проводимость может либо дойти до некоторого конечного значения,  $\sigma_m$ , при  $F \rightarrow E_c + 0$ , а затем скачком обратиться в нуль

\*) Дискретный характер уровней сохраняется благодаря тому, что состояниям, близким по энергии, как правило, соответствуют далеко отстоящие друг от друга центры локализации.

(рис. 2, а), либо обратиться в нуль непрерывно, причем производная  $d\sigma/dF$  может либо оставаться ограниченной при  $F \rightarrow E_c + 0$  (рис. 2, б), либо обращаться в бесконечность (рис. 2, в). Особенно существенным кажется различие между ситуациями, изображенными на рис. 2, а, с одной стороны, и на рис. 2, б, в — с другой. Величина  $\sigma_m$  получила название минимальной металлической проводимости. В определенных предположениях ее удается определить теоретически. Одно время казалось, что экспериментально вопрос почти решен в пользу возможности, представленной на рис. 2, а. В последние два года, однако, проблема минимальной металлической проводимости послужила предметом серьезной дискуссии; мы вернемся к ней в п. 5.

Заметим, что в условиях сильного вырождения электронного газа в зоне проводимости  $\sigma$  эффективно определяется только электронами с энергиями, близкими к  $F$ . Это позволяет ввести представление о проводимости (и подвижности) при данной энергии электрона,  $E$ , понимая под

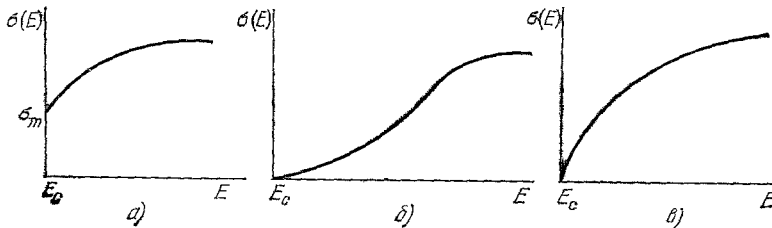


Рис. 2. Возможные типы поведения проводимости у порога подвижности.

этим функцию  $\sigma(F)$  ( $\mu(F)$ ). Это представление можно сохранить и при произвольной температуре и произвольной степени вырождения (включая и невырожденный газ), полагая, по определению,

$$\sigma(T) = \int_{E_c}^{\infty} \sigma(E, T) \left( -\frac{\partial n_F}{\partial E} \right) dE; \quad (1.1)$$

здесь  $n_F(E)$  — функция Ферми,  $\sigma(E, T)$  — функция температуры и энергии, а верхний предел заменен на бесконечность ввиду быстрого убывания  $n_F$  с ростом энергетического аргумента  $E$ . При  $T \rightarrow 0$  формула (1.1) принимает вид  $\sigma(0) = \sigma(E)_{E=F}$ . При одноэлектронной постановке задачи соотношение (1.1) непосредственно вытекает из формулы Кубо<sup>23</sup>, причем  $\sigma(E, T)$  явно выражается через соответствующие функции Грина. Аналогичную формулу можно написать и для дырок. Представление о проводимости, зависящей от энергии, позволяет сформулировать критерий локализации электронных состояний, основанный лишь на использовании непосредственно измеряемых на опыте величин<sup>27</sup>. Именно, естественно называть состояния с энергией  $E$  делокализованными (локализованными), если при  $T \rightarrow 0$  статическая электропроводность  $\sigma(E)$  отлична от нуля (равна нулю). Равенство

$$\lim_{T \rightarrow 0} \sigma(E, T) = 0 \quad (1.2)$$

мы будем впредь рассматривать как критерий локализации \*).

Следует заметить, однако, что, будучи безупречным теоретически, критерий (1.2), видимо, неудобен для численных расчетов. Дело в том,

\*) Видимо, он эквивалентен критерию, предложенному в работе<sup>28</sup>.

что в таких расчетах всегда — по необходимости — рассматриваются системы ограниченного размера, в то время как представление об электропроводности как самоусредняющейся величине<sup>23</sup>, строго говоря, оправдано лишь при выполнении термодинамического предельного перехода. В какой мере возможности современных ЭВМ позволяют аппроксимировать последнюю операцию — не вполне ясно. По этой причине были предложены и другие критерии<sup>29-32</sup> — в надежде, что они окажутся более удобными в расчетном отношении. Эквивалентность их критерию (1.2) строго, по-видимому, не доказана, но кажется довольно вероятной.

Наличие случайно распределенных в образце потенциальных ям и горбов случайной высоты, ширины и формы приводит к особенно важным следствиям в случае образцов низшей размерности. Довольно давно<sup>33,34</sup> уже была высказана мысль о том, что в одномерной неупорядоченной решетке все состояния электрона — бестоковые, т. е. порог подвижности отсутствует. Строгое доказательство этого утверждения было впервые получено в работах<sup>35,36</sup>. Из него вытекают, в частности, довольно серьезные следствия для физики одномерных «кристаллов», а также для физики кристаллов с одномерными дефектами, например дислокациями. Как известно<sup>38</sup>, линейные и винтовые дислокации, лишенные примесной атмосферы, приводят к появлению одномерных дислокационных зон. В кристалле, в других отношениях идеальном, носители заряда, заполняющие эти зоны, будучи локализованы вблизи дислокаций, могут свободно перемещаться вдоль них — в этом отношении они делокализованы. Однако, поскольку это движение — одномерное, сколь угодно слабое случайное поле приведет здесь к полной андерсоновской локализации. Соответственно, в реальных материалах при малой концентрации дислокаций проводимость в дислокационных зонах при низких температурах должна носить прыжковый характер \*). То же относится и к длинным органическим молекулам. Детальная теория прыжковой проводимости одномерных систем была в последние годы построена в работах<sup>39-42</sup> (см. также обзор<sup>43</sup>).

Картина энергетического спектра в двумерном неупорядоченном полупроводнике долгое время оставалась не вполне ясной. Сейчас распространено мнение, что, как и при  $d = 1$ , все электронные состояния в таких материалах — бестоковые (во всяком случае, если размеры образца достаточно велики). Этот вопрос подробнее рассматривается в следующем разделе.

## 2. Масштабная теория локализации \*\*)

Переход от режима, характерного для случая  $F > E_c$ , к режиму  $F < E_c$  в известной мере аналогичен фазовому переходу. Поэтому неудивительны попытки исследовать вопрос о наличии или отсутствии порога подвижности в неупорядоченных системах, пользуясь методами современной теории критических явлений<sup>44 \*\*\*</sup>). По-видимому, впервые такая постановка задачи была дана Ф. Вегнером<sup>46-48</sup>; см. также<sup>49</sup>. Изящный подход с помощью группы перенормировки был предложен в работах<sup>50,51</sup>. В них, однако, уравнения группы перенормировки были в сущности уга-

\*) Заметим, что прыжковый характер проводимости не обязательно влечет за собой сильную (экспоненциального типа) температурную ее зависимость. Известны случаи<sup>202</sup>, когда проводимость явно прыжковой природы зависела от температуры степенным образом.

\*\*) Термин «масштабная» употребляется как эквивалент английского «scaling».

\*\*\*) Для первоначального ознакомления с этой теорией можно рекомендовать книгу<sup>45</sup>.

даны. Последовательный их вывод в рамках довольно общей модели можно найти в работе <sup>52</sup>.

Изложение материала в этом параграфе в значительной мере следует методике <sup>50,51</sup>, хотя в отдельных пунктах и отличается от нее.

Центральная идея масштабной теории локализации состоит в следующем. Для образца конечных размеров определяется некоторая величина, связанная с проводимостью и, вообще говоря, зависящая от размеров образца. Далее изучается поведение этой величины при возрастании размеров образца и в конце концов совершается термодинамический предельный переход. Вопрос о выборе указанной величины, видимо, не вполне тривиален. В первых работах <sup>50,51</sup> в таком качестве фигурировало обратное сопротивление (conductance), связываемое с усредненным сдвигом уровней энергии при замене периодических граничных условий на «торцах» образца на антипериодические (расчет <sup>29</sup> показывает, что эта величина выражается той же формулой, что и обычное обратное сопротивление,  $R^{-1}$ , фигурирующее в законе Ома). Естественно ожидать, что уровни энергии, соответствующие локализованным состояниям, практически не должны меняться при такой замене. С другой стороны, собственные значения энергии, которым отвечают делокализованные волновые функции, должны сдвинуться при такой замене, сколь бы велик ни был размер образца. На этом рассуждении и основан критерий локализации, предложенный в работе <sup>29</sup>.

В последующих работах <sup>53,54</sup> в качестве величины, испытывающей масштабное преобразование, было предложено использовать обратную длину локализации. Думается, однако, что естественнее воспользоваться величиной, непосредственно измеряемой на опыте. В качестве таковой можно воспользоваться все же обратным сопротивлением образца, определяемым через закон Ома. Использование этой самоусредняющейся величины в физически реалистических системах, видимо, не должно привести к осложнениям, указанным в работе <sup>53</sup>.

Следует ожидать, что при неограниченном возрастании размеров образца его форма не будет играть существенной роли в интересующей нас задаче. Поэтому мы вправе рассматривать образец любой формы, например кубической (или, при  $d = 2$ , квадратной; в дальнейшем для краткости термин «куб» употребляется при любой размерности). При этом стандартная формула для сопротивления образца имеет вид

$$R^{-1} = \sigma L^{d-2}, \quad (2.1)$$

где  $L$  — длина ребра куба.

Удобно ввести безразмерное обратное сопротивление,  $g$ , полагая

$$g = R^{-1} \frac{2\hbar}{e^2} = \frac{2\hbar\sigma}{e^2} L^{d-2}. \quad (2.2)$$

Пользуясь этой формулой, следует иметь в виду, что длина  $L$  ограничена снизу: она должна превышать другие характерные длины, фигурирующие в рассматриваемой задаче. Их по меньшей мере три. Первая возникает при рассмотрении явлений переноса свободными носителями заряда, т. е. в области непрерывного энергетического спектра. Это есть длина свободного пробега по импульсу; в интересующих нас условиях это же есть и длина свободного пробега относительно упругих столкновений. Вторая характерная длина появляется (либо наличие ее неявно подразумевается) при рассмотрении явлений переноса в области дискретного спектра. Это есть квантовая корреляционная длина  $R_0$ , определяющая наименьшее возможное расстояние между уровнями одинаковой энергии.

Дело в том, что при  $T \rightarrow 0$  перенос заряда в данной области энергий может осуществляться только путем изоэнергетического туннелирования. Однако в силу известного из квантовой механики эффекта «отталкивания уровней» близким по энергии уровням непременно отвечают волновые функции, локализованные вблизи достаточно удаленных друг от друга точек (<sup>23</sup>, глава III, § 3). Если бы уровни не обладали собственной шириной,  $\delta$ , то длина  $R_0$  обратилась бы в бесконечность — в образце не могло бы быть двух одинаковых дискретных уровней с конечным расстоянием между соответствующими центрами локализации \*). Фактически, однако, значение  $\delta$  всегда отлично от нуля, по крайней мере для уровней, лежащих выше уровня Ферми. Тому есть две причины. Одна из них обусловлена принципиально неустранимым взаимодействием электронов с электромагнитным вакуумом (как в атоме) и с термостатом <sup>55</sup>, другая — током, протекающим через образец <sup>56-58</sup>. Действительно, сам факт протекания тока означает, что уровни, стационарные в его отсутствие, становятся нестационарными при его возникновении, т. е. приобретают конечную ширину. При  $\delta \neq 0$  длина  $R_0$  оказывается конечной. Точное выражение для нее вывести нелегко; ориентировочную оценку, однако, можно получить, пользуясь простейшим рассуждением Мотта (<sup>25</sup>, гл. 2). Для уровней, близких к расположенному в щели для подвижности уровню Ферми, мы имеем

$$R_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln \frac{V}{\delta} \quad (2.3)$$

здесь  $\alpha$  — обратная длина локализации (предполагаемая одинаковой для обоих рассматриваемых уровней ввиду их близости),  $V$  — характерная энергия взаимодействия электрона, локализованного вблизи одного из центров, с другим центром \*\*).

Очевидно, изоэнергетическое туннелирование возможно лишь, если  $L \geq R_0$ . Для ориентировочной оценки  $R_0$  положим

$$\alpha = 10^5 \text{ см}^{-1}, \quad \tau^{-1} \equiv \delta/\hbar = 10^4 \text{ с}^{-1}, \quad V = 1,4 \text{ эВ.}$$

Тогда  $R_0 \sim 10^{-4}$  см. Видимо, это число несколько занижено, так как занижены использованные нами значения  $\alpha$  и  $\tau^{-1}$ , но все же известную ориентацию она дает. Отметим, что такого же порядка величины (и больше) может оказаться и третья характерная длина — корреляционная длина случайного поля,  $\gamma^{-1}$ . Она определяет расстояние, на котором заметно убывает бинарная корреляционная функция флуктуаций потенциальной энергии электрона,  $U$ :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \langle U(0) U(\mathbf{r}) \rangle; \quad (2.4)$$

здесь угловые скобки означают усреднение по случайному полю,  $\langle U \rangle = 0$ . В частности, если случайное поле создано совокупностью хаотически распределенных в образце заряженных примесей, то роль  $\gamma^{-1}$  играет радиус экранирования. В системе типа аморфного кремния он может составить около  $10^{-3}$  см.

\*) Строго говоря, при числе атомов больше двух можно выбрать такую их конфигурацию, что некоторые уровни не расщепятся. Однако вероятность реализации такой конфигурации в системе многих частиц очень мала.

\*\*) При наличии порога подвижности  $E_c$  энергия  $V$  по порядку величины совпадает с разностью  $E_c - F$ ; при этом из формулы (2.3) получается выражение, приведенное в книге <sup>23</sup>. Отметим, что формула (2.3) основана на представлении об экспоненциальном убывании волновых функций на достаточно большом расстоянии от соответствующих центров локализации.



В дальнейшем мы будем рассматривать образцы с размерами, значительно превышающими как  $R_0$ , так и  $\gamma^{-1}$  \*). При этом последние длины не должны войти в выражение для обратного сопротивления, и уравнение для функции  $g(L)$  можно составить тем же способом, что и в работах <sup>50, 51</sup>.

Возьмем  $b^d$  кубов с длиной ребра  $L$  каждый и мысленно составим из них новый куб с длиной ребра  $bL$ . Этому кубу будет соответствовать новое значение безразмерного обратного сопротивления,  $g(bL)$ . Основное предположение масштабной теории состоит в том, что в рассматриваемых условиях функция  $g(bL)$  может зависеть только от прежнего своего значения и от числа  $b$  \*\*):

$$g(bL) = f[b, g(L)]. \quad (2.5)$$

Положим теперь

$$b = 1 + \varepsilon, \quad \varepsilon \rightarrow 0,$$

и разложим функцию  $g(bL)$  в ряд по степеням  $\varepsilon$ :

$$g(b, L) = g(L) + \varepsilon g(L) \frac{d \ln g}{d \ln L} + O(\varepsilon^2). \quad (2.6)$$

После элементарных преобразований получим

$$\frac{d \ln g(L')}{d \ln L'} = \beta[g(L')], \quad (2.7)$$

где  $L'$  — переменная, которую по окончании расчета надо отождествить с длиной образца  $L$ , а

$$\beta[g(L')] = g^{-1}(L') \left. \frac{df[b, g(L')]}{db} \right|_{b=1}. \quad (2.8)$$

Уравнение (2.7), полученное в работах <sup>50, 51</sup>, — основное для дальнейшего. Оно автономно — правая часть его содержит аргумент  $L'$  лишь неявно — только через искомую функцию  $g(L')$ . Иначе говоря, уравнение (2.7) описывает однопараметрическую группу преобразований — группу перенормировки \*\*\*). Исследуя поведение его решений при  $L \rightarrow \infty$ , что соответствует термодинамическому предельному переходу, мы сможем выяснить, равна ли нулю или отлична от нуля статическая электропроводность достаточно большого образца при  $T \rightarrow 0$ , т. е. сможем установить, локализованы или делокализованы волновые функции носителей заряда \*\*\*\*).

### 3. П р е д е л ь н ы е ф о р м ы $\beta(g)$ . Т е р м и ч е с к и е и н е о м и ч е с к и е э ф ф е к т ы

Чтобы извлечь из уравнения (2.7) какую-либо информацию, надо составить себе представление о поведении функции  $\beta(g)$ , т. е., в конечном счете, о поведении безразмерного обратного сопротивления при изменении  $L$ .

\*) Вопрос о коротких образцах требует особого исследования <sup>55</sup>, в которое мы здесь входить не будем. Отметим лишь, что в этих условиях статическая проводимость может оказаться отличной от нуля при любой энергии электрона. Локализованные состояния здесь удобнее определять как такие, вклад которых в статическую проводимость при достаточно большом размере образца монотонно убывает с ростом  $L$ .

\*\*) Роль других длин в работах <sup>50, 51</sup> не рассматривалась. Если бы они были сравнимы с  $L$ , то равенство (2.5) надо было бы обобщить, включив в число аргументов функции  $f$  и величины  $LR_0^{-1}$ ,  $\gamma L$ .

\*\*\*) Если бы длины  $R_0$  и  $\gamma^{-1}$  были сравнимы с  $L$ , то уравнение, аналогичное (2.8), оказалось бы неавтономным и рассуждения несколько усложнились бы <sup>55</sup>.

\*\*\*\*) В работах <sup>208, 209</sup> получены обобщения уравнения (2.7) на случай проводимости в переменном поле и на предмет учета взаимодействия между носителями заряда. Теория при этом, естественно, усложняется, но основные выводы, излагаемые в последующих параграфах, остаются в силе.

Отметим прежде всего, что при конечных значениях  $L$  функция  $\beta$  описывает группировку конечного числа кубов конечного размера. По этой причине естественно ожидать, что она будет вести себя достаточно регулярно. Это ожидание выражается следующими двумя гипотезами<sup>50,51</sup>:

а) Функция  $\beta(g)$  непрерывна и дифференцируема.

б) Функция  $\beta(g)$  монотонна.

Полного и строгого доказательства этих гипотез пока что нет, но они кажутся довольно правдоподобными. Отметим также, что следствия, из них вытекающие при  $d = 2$ , подтверждаются и результатами работы<sup>52</sup>, выполненной другим методом.

Если скоро гипотезы а) и б) приняты, для качественного исследования уравнения (2.7) достаточно определить лишь, как ведет себя функция  $\beta(g)$  в предельных случаях  $g \gg 1$  и  $g \ll 1$ . В первом случае мы имеем сравнительно слабое рассеяние; так может обстоять дело в системе свободных носителей заряда. В пределе при  $L \rightarrow \infty$  это соответствует области непрерывного энергетического спектра, т. е. делокализованным электронам. Второй случай соответствует системе локализованных электронов, т. е. области дискретного энергетического спектра.

Рассмотрим сначала случай  $g \gg 1$ . Здесь для вычисления  $g$  можно воспользоваться обычным кинетическим уравнением Больцмана. При этом в пределе при  $L \rightarrow \infty$  зависимость  $\sigma$  от  $L$  вообще исчезает. При учете поправок к результатам кинетического уравнения такая зависимость, однако, появляется. Как мы вскоре увидим, при рассмотрении двумерной системы она оказывается существенной. Соответствующие вычисления были выполнены в работах<sup>59,60</sup> в предположении, что электроны рассеиваются на примесях с короткодействующими силами. При  $d = 2$  ответ гласит

$$\sigma = \sigma_B - \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln \frac{L}{l_p}, \quad (3.1)$$

где  $\sigma_B$  — результат, получающийся из кинетического уравнения, а  $l_p$  — длина свободного пробега по импульсу. Формула (3.1) справедлива, пока первое слагаемое в правой ее части велико по сравнению со вторым, т. е. пока  $g \gg 1$ ; схематический вывод ее воспроизведен в приложении I \*).

В общем случае для делокализованных состояний мы получаем (см. приложение I)

$$\beta = d - 2 - \frac{c_d}{g}, \quad g \gg 1, \quad (3.2)$$

где по-прежнему через  $d$  обозначена размерность системы, а  $c_d$  суть положительные постоянные; в частности, при наличии только потенциального рассеяния (без переворота спина)  $c_2 = \pi^{-2}$ .

Обратимся теперь к случаю  $g \ll 1$ . Вероятность изоэнергетического туннельного перехода на расстояние  $R \geq R_0$  пропорциональна  $\exp(-2\alpha R)$ . Если  $L \gg R_0$ , то такие переходы могут происходить и на расстояния, заметно меньшие  $L$ ; перенос заряда через весь образец будет осуществляться тогда в результате цепочки изоэнергетических переходов этого типа, а результирующее значение  $g$  будет определяться перколяционными соображениями и лишь сравнительно слабо зависеть от  $L$ . Вместе с тем возможны и туннельные переходы «через весь образец»; вероятность их пропорциональна  $\exp(-2\alpha L)$ . Таким образом, при  $g \ll 1$  мы имеем<sup>55</sup>

$$g(L) = g_0(L) + g_1(L) \exp(-2\alpha L). \quad (3.3)$$

\*) Аналогичный результат получается<sup>56</sup> и при вычислении вещественной части проводимости на частоте  $\omega > 0$ : в двумерной задаче возникает поправка к результату кинетического уравнения, пропорциональная  $-\ln \omega \tau_p$ , где  $\tau_p$  — время релаксации импульса; предполагается, что  $\omega \tau_p \ll 1$ .

Первое слагаемое здесь соответствует указанной выше цепочке переходов, а второе — туннельному просачиванию электронов через весь образец.

В соответствии со сказанным выше функции  $g_0$  и  $g_1$  зависят от  $L$  гораздо слабее, чем  $\exp(-2\alpha L)$ , и при последующем дифференцировании по  $L$  производными от них можно пренебречь. Иначе говоря, в уравнении группы перенормировки их можно рассматривать как параметры. Вместе с тем сам факт зависимости  $g_0$  от  $L$  может быть важен в другом отношении: если, как мы вскоре увидим, в двумерной системе  $g(L) \rightarrow 0$  при  $L \rightarrow \infty$ , то и величина  $g_0(L)$  должна при этом обращаться в нуль.

Согласно формулам (2.8) и (3.3) мы получаем теперь

$$\beta = -\frac{2\alpha L g_1 \exp(-2\alpha L)}{g_0 + g_1 \exp(-2\alpha L)} = -\frac{g - g_0}{g} \ln \frac{g_1}{g - g_0}. \quad (3.4)$$

Поскольку величины  $g_0$  и  $g_1$  фигурируют здесь как параметры, это соотношение согласуется с утверждением об автономности уравнений (2.7).

Выражения (3.3) и (3.4) будут использованы в следующем параграфе для качественного исследования функции  $g(L)$ . Здесь же уместно сделать несколько замечаний о температурной и полевой зависимости электропроводности двумерной системы при низкой, но конечной температуре (речь может идти, например, об инверсионном слое, возникающем при определенных условиях около контакта полупроводника с диэлектриком в МДП-структуре (см. рис. 1). В этих условиях проводимость образца заведомо конечна (хотя может быть и мала), ибо термическое возбуждение обеспечивает возможность перемещения электронов через весь образец. Для ориентации в возникающих здесь возможностях проинтегрируем уравнение (2.7), пользуясь при этом формулой (3.2) для  $\beta$ . При  $d = 2$  получим, с учетом определения (2.2):

$$\sigma = \sigma_0 - \frac{e^2}{2\hbar} c_d \ln \frac{L}{L_0}, \quad (3.5)$$

где  $\sigma_0$  и  $L_0$  — постоянные. При слабом рассеянии это выражение, разумеется, есть тавтология, причем в качестве  $\sigma_0$  и  $L_0$  надо взять соответственно результат кинетического уравнения и длину свободного пробега по импульсу. Важно, однако, другое. При  $T \neq 0$  нижний предел интеграла (1.11) (т. е. числитель в аргументе логарифма в правой части (3.5)) может быть задан не только размером образца, но и неупругим рассеянием электронов фононами — коль скоро соответствующая длина свободного пробега,  $l_i$ , меньше  $L$ <sup>50,51</sup>. В этих условиях в интеграле (1.11) надо заменить  $L$  на  $\sqrt{l_i l_p}/2$ <sup>203 \*</sup>).

Далее, для времени релаксации относительно неупругого рассеяния,  $\tau_i$ , мы имеем<sup>61</sup>

$$\tau_i \sim T^{-q}, \quad q > 0.$$

Таким образом, при  $l_i < L$  второе слагаемое в формуле (3.4) заменяется на  $cq \ln T$ , где  $c$  — положительная постоянная. Вместе с тем величина  $\sigma_B$ , определяясь в основном упругим рассеянием носителей заряда на примесях, от температуры практически не зависит.

Такая логарифмическая зависимость статической проводимости действительно наблюдалась на опыте<sup>62,63</sup>, однако, как мы увидим в гл. II,

\*) В присутствии магнитного поля, а также при учете взаимодействия между электронами появляются и другие характерные длины (например, хорошо известная магнитная длина  $\sqrt{\hbar c/Bc}$ , где  $B$  — магнитная индукция). Определенная их комбинация также может появиться вместо  $L$ .

один лишь этот факт еще не означает экспериментального подтверждения правильности изложенных выше представлений.

Заметим, что <sup>50</sup>, коль скоро речь идет лишь о процессах испускания фононов при низкой температуре решетки, под температурой можно понимать и электронную температуру  $T_e$ , определяемую как мера средней энергии носителей заряда. Таким образом, возникает и вопрос о зависимости  $\sigma$  от напряжения на образце (или от силы измерительного тока).

В работе <sup>64</sup> была указана еще одна возможная причина неомичности образцов с локализованными носителями заряда. Она связана с «токовым» уширением уровней. В самом деле, при  $T \neq 0$  отличным от нуля становится и коэффициент диффузии электронов,  $D$ , в результате чего локализованное состояние электрона становится нестационарным. Соответствующая неопределенность энергии,  $\Delta E$ , связана со временем  $\tau_0$ , за которое электрон диффундирует на длину порядка  $l_1$ . Очевидно,  $\tau_0 \approx l_1^2/D$  и, следовательно,  $\Delta E \sim \hbar D/l_1^2$ . С другой стороны, энергия, приобретаемая электроном при перемещении на расстояние  $l_1$  в однородном электрическом поле напряженности  $\mathcal{E}$ , есть  $e\mathcal{E}l_1$ . Эта величина имеет смысл, если она больше  $\Delta E$ , т. е. если

$$l_1 < \left( \frac{\hbar D}{e\mathcal{E}} \right)^{1/3} \equiv l_{\mathcal{E}}. \quad (3.6)$$

В противном случае, когда  $l_1 > l_{\mathcal{E}}$ , максимальное расстояние, которое электрон может пройти, не меняя своей энергии, следует отождествить с  $l_{\mathcal{E}}$ . Так обстоит дело при достаточно низких температурах. Если, сверх того,

$$l_{\mathcal{E}} < L, \quad (3.7)$$

то в качестве нижнего предела интеграла (1.11) надо взять величину  $l_{\mathcal{E}}^{-1}$ . Неравенство (3.7) означает, что напряжение на образце,  $\mathcal{E}L$ , превышает  $\hbar D/eL^2$ . Для макроскопических образцов это условие выполняется, видимо, при всех реалистических условиях опыта. Так, полагая для оценки  $D = 10 \text{ см}^2/\text{с}$   $L = 0,1 \text{ см}$ , мы получаем, что напряжение  $\mathcal{E}L$  должно превышать  $0,6 \cdot 10^{-12} \text{ В}$ .

Очевидно, в рассматриваемых условиях равенство (3.1) следует переписать в виде \*)

$$\sigma = \sigma_B + \delta\sigma, \quad (3.8)$$

где

$$\delta\sigma = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln \frac{l_{\mathcal{E}}}{l_p} = \text{const} \cdot \ln \mathcal{E} \quad (3.9)$$

( $\text{const} > 0$ ). Формулы (3.8), (3.9) остаются в силе, пока  $l_{\mathcal{E}} < l_1(T)$ ,  $l_{\mathcal{E}} < L$ . В какой мере замечен этот эффект на фоне нагрева электронного газа электрическим полем — пока не вполне ясно.

#### 4. Качественное исследование уравнения (2.7).

Локализация состояний при  $d = 1, 2$

Согласно гипотезе а) (п. 3) особыми точками уравнения (2.7) могут быть только нули функции  $\beta(g)$ , а из гипотезы б) вытекает, что этих нулей — не более одного. Формулы (3.2) и (3.4) дают:

\*) Разумеется, изложенные выше соображения о роли электрического поля оправданы лишь при  $l_1(T_e) > l_p$ ,  $l_{\mathcal{E}} > l_p$ .

а) При  $g \gg 1$ :

$$\beta > 0, \quad d = 3; \quad \beta < 0, \quad d = 1, 2. \quad (4.1)$$

б) При  $g \ll 1$ :

$$\beta < 0, \quad d = 1, 2, 3. \quad (4.2)$$

Отметим, что при  $d = 1$  и  $d = 3$  неравенства (4.1) вытекают из чисто «геометрических» соображений, определяясь лишь размерностью системы; малые поправки к результатам кинетического уравнения при этом не играют роли. С другой стороны, при  $d = 2$  учет этих поправок важен принципиально. В отсутствие их мы получили бы  $\beta = 0$ .

Неравенства (4.1) и (4.2) позволяют построить качественную картину поведения функции  $\beta(g)$  при различных значениях  $g$  (рис. 3). Видим, что при  $d = 3$  особая точка  $g = g_c$  заведомо имеется (хотя формулы (3.3) и (3.4) и не позволяют точно найти величину  $g_c$ ), а при  $d = 1, 2$  ее нет. Физическое значение особой точки уравнения (2.7) можно понять, воспользовавшись представлениями современной теории критических явлений<sup>44</sup>. В этой теории неустойчивые особые точки уравнений типа (2.7) суть критические точки. Легко убедиться, что в нашем случае имеет место нечто подобное. В самом деле, рассмотрим кривую для  $d = 3$ ; пусть  $\beta(g) = 0$  при  $g = g_c$ , и пусть значение  $g$  слегка отклонилось от  $g_c$ . Тогда, согласно (2.7),

$$\text{sign } \frac{d \ln g}{d \ln L} = \text{sign } (g - g_c). \quad (4.3)$$

Отсюда следует, что рассматриваемая особая точка неустойчива: при  $g < g_c$  значения  $g(L)$  будут уменьшаться с увеличением  $L$ , т. е. в пределе бесконечно большого образца мы получим  $g(L) \rightarrow 0$ . Это — область локализованных состояний. С другой стороны, при  $g > g_c$  функция  $g(L)$  будет возрастать с увеличением  $L$ ; в пределе бесконечного образца мы получим асимптотику (2.2) при проводимости  $\sigma$ , не зависящей от  $L$ . Это — область делокализованных состояний.

Таким образом, особая точка уравнения (2.7) — нуль функции  $\beta(g)$  — определяет не что иное, как порог подвижности. Как видно из рис. 3, уравнение (2.7) в сочетании с принятыми выше гипотезами приводит к следующим выводам:

а) При  $d = 3$  имеется порог подвижности, т. е. в рассматриваемой системе имеются как локализованные, так и делокализованные состояния.

б) При  $d = 1$  и  $d = 2$  порог подвижности отсутствует всегда, т. е. все состояния — локализованные<sup>\*</sup>). Следует заметить, что при  $d = 2$  этот вывод (ср. с замечанием после формулы (4.2)) существенно основан на наличии и знаке поправочного слагаемого в правой части (3.2).

Знак этого слагаемого, однако, зависит от природы сил взаимодействия между электронами и рассеивающими центрами. В работах<sup>59,60</sup>

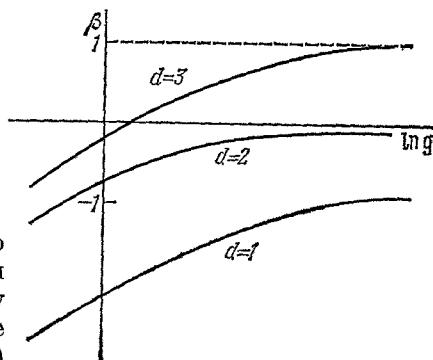


Рис. 3. Ориентировочный вид функции  $\beta(g)$  в системах различной размерности.

<sup>\*</sup>) Такой же результат был получен и в работах<sup>101, 102</sup>.

рассматривалось только потенциальное рассеяние носителей заряда. Учет рассеяния на магнитных примесях <sup>65</sup> может привести к исчезновению зависимости проводимости от размера образца. Действительно, при этом (см. приложение I) появляется еще одна характерная длина свободного пробега,  $l_m = v_F \sqrt{\tau \tau_m}$ , где  $v_F$  — фермиевская скорость,  $\tau$  и  $\tau_m$  — время на затухания одноэлектронных состояний соответственно при рассеянии на немагнитных и магнитных примесях (с короткодействующими силами в обоих случаях). Если  $l_m < L$ , то именно величина  $l_m^{-1}$  определяет нижний предел интеграла (1.11). При этом функция  $\beta(g)$  при  $d = 2$ , достигнув нуля, вообще перестает изменяться. Поскольку нет причин считать  $g_c \gg 1$ , случай  $g \gg 1$  здесь, вообще говоря, не реализуется, и весь подход, основанный на рассмотрении электронного газа со слабым рассеянием, оказывается неправомерным.

Нуль  $\beta(g)$  при  $g \gg 1$  не появляется и во внешнем магнитном поле, если имеет место и рассеяние на магнитных примесях <sup>52</sup>. В указанной ситуации локализация всех электронных состояний в двумерной системе возникает, по-видимому, лишь в достаточно сильном случайном поле. Отсюда следует, что в рассматриваемой системе должно наблюдаться отрицательное магнетосопротивление: вызывая хотя бы частичную делокализацию носителей заряда, магнитное поле тем самым приводит к возрастанию электропроводности образца.

Видим, таким образом, что ответ на вопрос о том, все ли состояния в двумерной системе локализованы, зависит от конкретной природы сил, действующих на электроны и дырки, т. е. не только от геометрии, но и от динамики.

С другой стороны, вывод о том, что при  $d = 1$  все состояния оказываются бестоковыми в сколь угодно слабом (но не равном нулю) случайном поле, не связан с конкретной природой последнего. В этом смысле масштабная теория локализации лишь несколько дополняет прежние результаты.

Физическая причина различия между трехмерной системой, с одной стороны, и двумерной и одномерной — с другой, связана, по-видимому, с характером случайных блужданий в этих системах <sup>52, 66</sup>. Согласно известной теореме Поля <sup>67, 68</sup> при  $d = 1$  и  $d = 2$  в результате таких блужданий частица вновь и вновь возвращается сколь угодно близко к исходной точке. Соответственно, рассеяние на каждом центре неизбежно оказывается многократным, а взаимодействие электрона с каждым отдельным рассеивающим центром — сильным даже при малой амплитуде рассеяния в единичном его акте. С другой стороны, в трехмерной системе такие многократные возвраты могут быть несущественными.

### 5. Проблема минимальной металлической проводимости ( $d = 3$ )

В работах <sup>50, 51</sup> была сделана также попытка исследовать вопрос о минимальной металлической проводимости на базе уравнения (2.7). Для этой цели следует решить названное уравнение в области значений  $g$ , близких к  $g_c$ , и затем связать масштабный параметр  $L$  с величиной

$$\eta = E - E_c (> 0). \quad (5.1)$$

После этого равенство (2.2) определит  $\sigma(\eta)$ .

Удобно переписать уравнение (2.7) в виде

$$\frac{dg}{dL} = \frac{g}{L} \beta(g). \quad (5.2)$$

В соответствии с гипотезами, принятыми в п. 3, авторы работ <sup>50, 51</sup> полагают

$$g\beta(g) = \frac{g - g_c}{\nu} \quad (5.3)$$

причем, как видно из рис. 3,  $\nu > 0$  при любом знаке разности  $g - g_c$ ; в дальнейшем в этом разделе нас будет интересовать случай  $g > g_c$ . Вблизи точки  $g_c$  множитель  $g$  в левой части (5.3) можно заменить на  $g_c$ . Таким образом, уравнение (5.2) принимает вид

$$L \frac{dg}{dL} = \frac{g - g_c}{\nu g_c} \quad (5.2')$$

Проинтегрируем это уравнение от некоторой точки  $g_0 = g(L_0)$ , сколь угодно близкой к  $g_c$  и соответствующей энергии  $E$ , до произвольной точки  $g(L)$  (в пределах применимости аппроксимации (5.3)). Получим

$$\ln \frac{g - g_c}{g_0 - g_c} = \nu^{-1} \ln \frac{L}{L_0},$$

т. е.

$$L = L_0 \left[ \frac{g(L) - g_c}{g_0 - g_c} \right]^\nu \quad (5.4)$$

Чтобы получить отсюда представление о виде функции  $\sigma(\eta)$ , надо сделать какие-то предположения о зависимости величины  $g$  от энергии электрона,  $E$ . В работах <sup>50, 51</sup> использована простейшая линейная связь

$$g - g_c = \left( \frac{dg}{dE} \right)_{g=g_c} (E - E_c). \quad (5.5)$$

Тогда, согласно (5.4),

$$L \sim \eta^{-\nu} \quad (5.6)$$

и равенство (2.2) дает (при  $\eta \ll 1$ )

$$\sigma = \frac{e^2}{2\hbar} g_c [L(\eta)]^{2-d} \sim \eta^{-(2-d)\nu}. \quad (5.7)$$

Таким образом, при  $d = 3$  мы получаем  $\sigma \sim \eta^\nu \rightarrow 0$  при  $E \rightarrow E_c$  — представление об отличной от нуля минимальной металлической проводимости не подтверждается. При этом в зависимости от величины критического индекса  $\nu$  реализуется один из двух случаев, показанных на рис. 2, б, в.

Этот вывод, однако, представляется не вполне убедительным по двум причинам <sup>58, 69</sup>.

Во-первых <sup>69</sup>, даже если принять общий подход, принятый в работах <sup>50, 51</sup>, остается неясным, всегда ли оправданы соотношения (5.3) и (5.5). Действительно, если предположение о существовании минимальной металлической проводимости справедливо, то при  $\eta = 0$  функция  $\sigma(\eta)$  должна иметь точку разрыва первого рода.

Если, что в духе масштабной теории представляется естественным, считать функцию  $L(\eta)$  непрерывной, то разрыв должно испытывать и безразмерное обратное сопротивление  $g(\eta)$  (или  $g(L)$ ); в сущности это и делает опасным интегрирование уравнения (5.2') непосредственно от точки  $g = g_c$ . Следовательно, при  $g = g_c$  функция  $\beta(g)$  должна иметь особенность, и уравнение (2.7) надо писать отдельно для  $g > g_c$  и  $g < g_c$ . Левую часть (2.7) при этом надо понимать как производную справа или слева.

Вводя, как и раньше, точку  $g_0$ , близкую к  $g_c$ , мы получаем из (2.7) в области  $g > g_c$ :

$$L = L_0 \exp \left[ \frac{1}{g_c} \int_{g_0}^g \beta^{-1}(g) dg \right]. \quad (5.8)$$

Однако, в отличие от (5.3) и (5.5), положим теперь \*)

$$g = g_c + a\eta^m, \quad \beta = \frac{(g - g_c)^n}{vg_c}, \quad (5.9)$$

где  $a > 0$ ,  $m > 0$ ,  $1 \geq n > 0$ .

Тогда (при  $n < 1$ )

$$L \sim \exp \left[ -\frac{v}{1-n} (a\eta^m)^{1-n} \right]. \quad (5.10)$$

Следовательно, при  $d = 3$

$$\sigma \sim \exp \left[ -\frac{v}{1-n} (a\eta^m)^{1-n} \right]. \quad (5.11)$$

При  $\eta \rightarrow 0$  это выражение остается отличным от нуля. Видим, таким образом, что предположение о той или иной аналитической структуре функции  $\beta(g)$  при  $g \rightarrow g_c$  по сути дела эквивалентно априорному предположению о наличии или отсутствии конечной минимальной металлической проводимости. Иначе говоря, для решения поставленной задачи требуется независимая информация динамического характера.

Во-вторых, в работе <sup>58</sup> высказано утверждение о том, что с величиной  $g_c$  — нулем функции  $\beta$  — не связана никакая характерная физическая длина. По этой причине интеграция уравнения (5.2) с учетом (5.3) дает при  $g - g_c \ll g_c$ :

$$1 - \frac{g_c}{g} = \left( \frac{L}{L_0} \right)^{1/v}, \quad (5.12)$$

где  $L_0$  — не более чем постоянная интегрирования \*\*). Отсюда, согласно <sup>58</sup>, нельзя сделать никаких выводов касательно значения  $\sigma(E_c)$ . Действительно, равенство  $\sigma(E_c) = 0$  означало бы при  $d = 3$ , что  $g$  остается конечным при  $L \rightarrow \infty$ . Однако в соотношении (5.12) предельный переход  $L \rightarrow \infty$  явно невозможен. Последнее, по мнению авторов <sup>58</sup> (с которым согласен и автор обзора), может быть связано с недостаточностью приближенного соотношения (5.3) при  $L \rightarrow \infty$ .

Утверждение о том, что, не определив постоянную интегрирования, т. е. не дополнив уравнение (5.2) каким-то граничным условием, нельзя найти из него значение  $\sigma(E_c)$ , вряд ли может вызвать сомнения. Однако для решения вопроса о том, равно ли это значение нулю или нет, требуется, может быть, несколько меньшая информация. В настоящее время вопрос кажется открытым.

Другая постановка вопроса была дана в работах Н. Мотта <sup>70,71</sup> и М. Пеппера <sup>204</sup>. Идея состоит в учете крупномасштабных флуктуаций потенциальной энергии электрона в случайном поле. При этом оказывается возможным связать задачу о минимальной металлической проводимости с расчетом длины локализации, характеризующей волновые функции электронов в дискретном спектре.

\*) В работе <sup>69</sup> параметр  $v$  определен иначе: в принятых здесь обозначениях он соответствует  $1/vg_c$ .

\*\*) В работе <sup>58</sup> в показателе степени в правой части уравнения, соответствующего (5.12), вместо  $1/v$  стоит  $v$ . Видимо, это — опечатка, не влияющая, однако, на дальнейшие рассуждения.



Указанные флуктуации можно описывать как плавное случайное искривление зон (рис. 4; более подробное рассмотрение можно найти в книге <sup>23</sup>, п. II.12); средняя величина этого искривления может быть мала или велика в зависимости от конкретной природы поля, но в принципе оно есть всегда. Наличие такого искривления приводит к необходимости отличать локальные границы зон проводимости и валентной,  $E'_v$  и  $E'_c$ , от границ зон, понимаемых как пороги подвижности,  $E_v$  и  $E_c$ . Последние в макроскопически однородном образце не зависят от координат, первые — зависят. Обозначив через  $\delta U(x)$  плавную часть случайного поля, можем написать

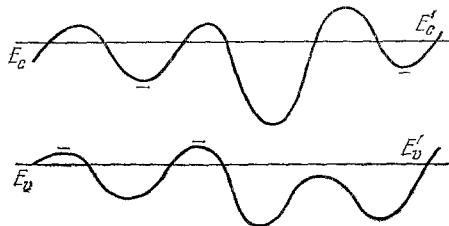
$$E'_c(x) = E_c + \delta U(x). \quad (5.13)$$

Роль плавного искривления зон в интересующей нас задаче можно понять с помощью следующих качественных рассуждений, в основном принадлежащих Мотту.

Пусть сначала  $\delta U(x) = 0$ . Следует ожидать, что при этом волновая функция электрона проводимости,  $\psi$ , при стремлении энергии к порогу

Рис. 4. Плавное искривление зон в полупроводнике со случайным полем.

Черточками обозначены дискретные уровни.



подвижности будет сравнительно медленно изменяться в пространстве. Точный смысл этого выражения состоит в следующем: представим  $\psi$  в виде разложения по атомным волновым функциям,  $\varphi_n$ , как это делается в известном методе сильно связанных электронов <sup>24</sup>.

$$\psi = \sum_n a_n \varphi_n. \quad (5.14)$$

При случайном расположении атомов в пространстве фазы коэффициентов  $a_n$  могут быть случайными, но, по смыслу представления о делокализации, амплитуды  $|a_n|$  при  $E \rightarrow E_c + 0$  не должны сильно флуктуировать при переходе от одного объема, содержащего много атомов, к другому такому же объему. Иначе говоря, здесь нет причин, которые могли бы воспрепятствовать свободному перемещению электронов с указанной энергией через весь образец.

При  $\delta U \neq 0$  положение дел, однако, может измениться. Действительно, обозначим через  $E$  энергию какого-нибудь электрона — локализованного или делокализованного. При достаточно большом значении  $|\delta U(x)|$  разности  $E - E_c$  и  $E - E'_c$  могут оказаться разного знака. В этом смысле можно говорить, что плавное искривление зон «перемешивает» «локализованные» и «делокализованные» состояния \*). Ясно, что при этом плавные крупномасштабные флуктуации потенциальной энергии электрона должны привести и к крупномасштабным флуктуациям амплитуд,  $|a_n|$ . Иначе говоря, здесь при  $E \rightarrow E_c + 0$  могут возникнуть области, практически

\*) Во избежание недоразумений подчеркнем, что речь идет здесь о пространственной делокализации электронов и дырок в пределах области, в которой функции  $E'_c(x)$  и  $E'_v(x)$  остаются примерно постоянными. Деление состояний на локализованные и делокализованные в смысле условия  $\sigma = 0$  ( $\sigma \neq 0$ ) при  $T \rightarrow \infty$  определяется, разумеется, только разностями  $E_c - E$ ,  $E - E_v$ .

недоступные для электронов. Мы приходим, таким образом, к стандартной перколяционной задаче, и следует ожидать (<sup>23</sup>, гл. IV), что вклад состояний с данной энергией  $E$  в перенос заряда будет исчезающе мал.

Рассмотрим теперь волновые функции, которые при  $\delta U = 0$  принадлежали бы дискретному спектру при  $E \rightarrow E_c - 0$ . Как и в случае непрерывного спектра, их можно представить в виде (5.14); однако теперь

$$a_{\pi} \sim \exp(-\alpha r), \quad (5.15)$$

где  $\alpha$  — обратная длина локализации, а координата  $r$  отсчитывается от центра локализации. (В дальнейшем нас будут интересовать значения  $r$ , значительно превышающие межатомные расстояния; поэтому точное положение центра локализации несущественно.) Рассматриваемые функции представляют интерес для нашей задачи потому, что при наличии плавного искривления зон уровни дискретного спектра следует отсчитывать от локальных границ зон  $E'_c$  и  $E'_v$  и радиус локализации электрона с энергией  $E < E'_c$  определяется разностью  $E'_c(x) - E$ . Вблизи порога подвижности для  $\alpha$  можно положить

$$\alpha \sim (E'_c - E)^s, \quad (5.16)$$

где  $s$  — неотрицательное число. В отличие от глубоких уровней, значение  $s$  здесь зависит от параметров, характеризующих случайное поле в образце; вообще говоря,  $s \neq 1/2$ .

Полагая теперь  $E \rightarrow E_c$ , мы получаем из (5.16) и (5.13)

$$\alpha \sim [\delta U(\mathbf{x})]^s. \quad (5.17)$$

Нас интересует случай  $\delta U > 0$ . Действительно, тогда при  $E \rightarrow E'_c - 0$  разность  $E - E_c = E - E'_c + \delta U$  оказывается положительной, т. е. в данной области пространства рассматриваемый уровень располагается выше порога подвижности. Отметим, что экспоненциальный (не осциллирующий) вид волновой функции не означает сейчас, что состояние с энергией  $E$  действительно локализовано: условие  $\delta U(\mathbf{x}) > 0$  соблюдается лишь в пределах некоторых ограниченных объемов. Именно по этой причине, однако, могут возникнуть большие и крупномасштабные флуктуации  $|\psi|^2$  при переходе в другие области пространства. Задача состоит теперь в том, чтобы понять, когда такие флуктуации возникают на самом деле. Для этой цели заметим, что в отсутствие неточечных структурных дефектов (типа радиационных) крупномасштабная флуктуация потенциальной энергии электрона, охватывающая объем из большого числа атомов, обусловлена как раз флуктуациями числа атомов в этом объеме. Обозначим характерный линейный размер последнего через  $R$ , а среднее расстояние между атомами — через  $\bar{r}$ . Тогда среднее число атомов в данном объеме  $N \sim (R/\bar{r})^3$ . Нас интересует случай  $N \gg 1$ ; при этом для среднеквадратичной флуктуации числа частиц в данном объеме,  $\delta N$ , мы имеем

$$\frac{\delta N}{N} \sim N^{-1/2} \sim \left(\frac{\bar{r}}{R}\right)^{3/2} \ll 1. \quad (5.18)$$

Естественно ожидать, что в условиях (5.18) среднеквадратичное значение  $\delta U$  будет удовлетворять соотношению

$$\delta U \sim \frac{\delta N}{N},$$

т. е. согласно (5.17) и (5.18),  $\alpha R \sim (R/\bar{r})^{1-(3s/2)} \sim (\delta U)^{s-(2/3)}$  и, следовательно, при  $E \rightarrow E_c - 0$

$$\alpha R \sim |E - E_c|^{s-(2/3)}. \quad (5.19)$$

Желая оценить, сколь сильно флуктуирует  $|\psi|^2$ , следует подставить это выражение в качестве  $\alpha r$  в формулу (5.15). Видим, таким образом, что при  $s \geq 2/3$  величина  $|\psi|^2$  флуктуирует не слишком сильно и не успевает затухать в пределах рассматриваемого нами объема. В соответствии со сказанным выше здесь можно ожидать отличного от нуля значения минимальной металлической проводимости.

С другой стороны, при  $s < 2/3$  величина  $\alpha R$  неограниченно возрастает при  $E \rightarrow E_c \rightarrow 0$ . Следовательно,  $|\psi|^2$  быстро изменяется в пространстве и затухает, не достигнув границ рассматриваемого объема. Это — второй из указанных выше случаев; следует ожидать, что здесь  $\sigma_m = 0$ .

Таким образом, в указанном подходе вопрос о наличии или отсутствии минимальной металлической проводимости сводится к вопросу о соотношении между фактическим показателем степени  $s$  и критическим его значением  $s_c = 2/3$ . Согласно К. Фриду<sup>72</sup> и С. Ф. Эдвардсу<sup>73</sup>  $s = 2/3$ . Указывались и другие значения  $s$ ; существенно, однако, что все эти результаты относятся лишь к специальному типу случайного поля, для которого бинарная корреляционная функция (2.4) имеет  $\delta$ -образный вид:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Phi_0 \delta(\mathbf{r}).$$

При других типах случайного поля ситуация оказывается, по-видимому, более сложной, так как соответствующие корреляционные функции характеризуются уже не одним параметром  $\Phi_0$ , а по меньшей мере двумя. Конкретные значения индекса  $s$  здесь еще предстоит получить; вместе с тем кажется ясным, что результаты будут зависеть от характеристик рассматриваемого случайного поля. Иначе говоря, мы приходим к прежнему заключению: эвентуальный вывод о нулевом или ненулевом значении  $\sigma_m$  не носит универсального характера — он связан с динамическими особенностями системы.

## 6. Степенная локализация в двумерной системе

Как мы видели в п. 4, 5, в двумерной неупорядоченной системе возможна полная локализация всех состояний электронов и дырок. По-видимому, то же относится и к другим элементарным возбуждениям — фононам, магнонам и т. д. Однако ряд экспериментальных данных (см. обзор<sup>74</sup>) заставляет думать, что в двумерной системе, подобно трехмерной, существует некоторая критическая энергия,  $E_c$ , разделяющая состояния различного типа. Электроны, заполняющие состояния разных типов, вносят существенно различные вклады в перенос заряда. Именно, при энергиях  $E < E_c$  имеет место прыжковая проводимость обычного типа, экспоненциально зависящая от температуры, в то время как температурная зависимость статической проводимости, обусловленной электронами с энергиями  $E > E_c$ , должна быть заметно более слабой.

Из сказанного следует, что при  $E_v < E < E_c$  располагаются, по всей вероятности, дискретные энергетические уровни обычного типа: асимптотически на большом расстоянии,  $r$ , от данного центра локализации волновая функция электрона,  $\psi$ , с точностью до возможных (несущественных) степенных множителей имеет вид

$$\psi \sim \exp(-\alpha r), \quad (6.1)$$

где  $\alpha \sim (E_c - E)^s$  или  $\alpha \sim (E - E_v)^s$  (значения неотрицательного числа  $s$  могут быть различными). Об этом говорят как об экспоненциальной локализации. Несколько лет назад считалось, что при  $E > E_c$  (или при  $E < E_v$ ; впредь эта возможность всегда будет подразумеваться) электронные

состояния в рассматриваемой системе делокализованы, как и при  $d = 3$ . Теперь эту точку зрения приходится признать неуниверсальной. Естественно возникает вопрос: что же происходит в двумерной системе при  $E > E_c$ ? В работе <sup>75</sup> была высказана мысль о том, что в этой области имеет место не экспоненциальная, а степенная локализация носителей заряда: асимптотически на больших расстояниях от центра локализации волновые функции электронов убывают по степенному закону \*) (об этом иногда говорят как о слабой локализации).

В принципе возможность степенной локализации решений уравнения Шредингера известна очень давно <sup>76</sup>; она рассматривалась и в современной монографической литературе <sup>77,78</sup>. В связи с физикой неупорядоченных материалов эта возможность обсуждалась в статьях <sup>79,80</sup> и в книге <sup>23</sup> (при  $d = 3$ ). Во всех этих работах, однако, рассматривался случай одной потенциальной ямы, ответственной за возникновение волновых функций рассматриваемого типа. В интересующей нас задаче, очевидно, требуется обобщение этих результатов на случай конечной концентрации ям,  $n_t$ , а также на предмет учета полного случайного поля (под последним термином мы будем понимать ту часть случайной потенциальной энергии электрона, которая не сводится к совокупности ям, ответственных за степенную локализацию) <sup>81</sup>.

Удобно все же начать с рассмотрения двумерной задачи об отдельной яме (при достаточно малых значениях  $n_t$  это могло бы иметь и реальный смысл). Совместим начало координат (при  $d = 2$ ) с центром данной ямы и обозначим через  $r$  и  $\varphi$  полярные координаты на плоскости, а через  $V(r, \varphi)$  — потенциальную энергию электрона в данной яме. В соответствии со сказанным выше будем искать такие решения уравнения Шредингера о потенциальной энергией  $V$ , которые на достаточно больших расстояниях от центра имеют вид

$$\psi = Nr^{-n}f(r, \varphi); \quad (6.2)$$

здесь  $N$  — нормировочный множитель,  $f(r, \varphi)$  — безразмерная функция, периодическая по  $\varphi$  с периодом  $2\pi$ ; при  $r \rightarrow \infty$  она либо имеет конечный предел,  $f_\infty(\varphi) \neq 0$ , либо осциллирует (с амплитудой, не зависящей от  $r$ ). Характер стремления  $f$  к пределу может быть различным; заметим лишь, что, поскольку точка « $r \rightarrow \infty$ » в рассматриваемой системе физически ничем не выделена, производные  $\partial f/\partial r$  и  $\partial^2 f/\partial r^2$  должны быть ограничены при  $r \rightarrow \infty$ . Из дальнейшего будет видно также, что условие бестоковости рассматриваемых состояний сводится к требованию вещественности  $f$ .

Обозначим через  $a$  расстояние от центра, на котором с приемлемой точностью происходит выход на асимптотику (6.2).

Для простоты будем считать, что это — единственная характерная длина задачи (об одной яме). Тогда из соображений размерности следует, что при  $n > 1$  мы имеем  $N \sim a^{n-1}$ . При  $n = 1$  (этот случай рассматривался в работе <sup>75</sup>) функция (6.1) нормируема лишь в ограниченном объеме и  $N \sim -\ln(an_t^{1/2})$ .

Очевидно, рассмотрение решений типа (6.2) может иметь смысл лишь при

$$a \ll n_t^{-1/2}; \quad (6.3)$$

это неравенство и определяет точный смысл слов «достаточно малая концентрация ям».

\*) Предположение о возможности степенной локализации было высказано также в работах <sup>103, 104</sup> на основании численных расчетов.

Подставляя функцию (6.2) в соответствующее уравнение Шредингера, мы получаем

$$-\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2n-1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} - \frac{n^2}{r^2} f = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) f. \quad (6.4)$$

При  $r \gg a$  функция  $V(r, \varphi)$  должна стремиться к некоторому постоянному значению  $V_0$  — в противном случае представление об отдельной потенциальной яме не имело бы смысла в рассматриваемой системе.

Из сказанного ранее об асимптотическом поведении производных от  $f$  вытекает, что нетривиальное решение типа (6.2) существует лишь при единственном собственном значении энергии  $E = V_0$ . Наконец, выбирая начало отсчета энергии так же, как и в случае (6.1), видим, что  $V_0 = E_c$ , дискретный уровень, принадлежащий решению (6.2), совпадает с  $E_c$ . Это — хорошо известный результат<sup>76-78,80,23</sup>. Уравнение (6.4) следует рассматривать теперь как определение потенциальной энергии  $V(r, \varphi)$  при а priori навязанной функции  $f(r, \varphi)$ . Очевидно, так определенная функция  $V(r, \varphi)$  действительно убывает на бесконечности. В силу большого произвола в выборе  $f$  и  $n$  таких  $я$  может быть довольно много. Следует, однако, заметить, что ситуация такого типа неустойчива: даже малые возмущения потенциальной энергии могут привести к сдвигу энергии и соответственно к исчезновению решений типа (6.2). Указанные возмущения могут быть связаны как с наличием других потенциальных  $я$  того же типа, что и в (6.4), так и с полным случайным полем в неупорядоченном материале. Рассмотрим сначала роль первого из указанных факторов. Главную роль здесь играет известный эффект «отталкивания» уровней; в условиях (6.2) он, очевидно, должен быть еще более заметным, чем в случае (6.1).

Удобно начать с рассмотрения двух  $я$ , расположенных в точках  $\mathbf{r} = 0$  и  $\mathbf{r} = \mathbf{R}$  ( $\mathbf{r} = \{r, \varphi\}$ ). Такой подход оправдан, если  $R \gg a$ , но, с другой стороны, остальные  $я$  еще более удалены от двух, явно рассматриваемых; в условиях (6.3) это возможно, коль скоро  $R < n_i^{-1/2}$ . Суть дела проще всего понять на примере одинаковых  $я$ , когда  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ . Пусть  $\psi_1$  и  $\psi_2$  — волновые функции задачи об одной  $я$ , расположенной соответственно у точек  $\mathbf{r} = 0$  и  $\mathbf{r} = \mathbf{R}$ . По предположению, эти функции одинаковы по форме, но центрированы вокруг разных точек. Как всегда в подобных задачах, волновую функцию электрона в системе двух  $я$  можно искать в виде

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad (6.5)$$

где  $c_1$  и  $c_2$  — постоянные коэффициенты. Подставляя это выражение в уравнение Шредингера с потенциальной энергией  $V(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ , легко получить систему уравнений для коэффициентов  $c_1$  и  $c_2$ ; решая ее, можно найти собственные значения энергии электрона, движущегося в поле двух  $я$ .

Положим

$$\begin{aligned} A &= \int \psi_1^2(\mathbf{r}) V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) d\mathbf{r}, \quad S = \int \psi_1(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r} + \mathbf{R}) d\mathbf{r}, \\ B &= \int \psi_1(\mathbf{r}) V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \psi_2(\mathbf{r} + \mathbf{R}) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Заметим, что при вычислении электропроводности в качестве базисной системы функций удобно выбрать ортогонализированные комбинации типа (6.5). При температуре  $T \rightarrow 0$  статическая электропроводность,  $\sigma$ , определяется изоэнергетическими переходами; следовательно, в данном базисе в формуле для  $\sigma$  фигурируют только диагональные элементы плотности тока. По этой причине принятое выше условие вещественности  $f$  обеспечивает бестоковый характер рассматриваемых электронных состояний.

Стандартным путем легко получаем два собственных значения энергии электрона:

$$E_{\pm} = \frac{A \pm B}{1 \pm S}, \quad (6.7)$$

причем

$$\left( \frac{c_2}{c_1} \right)_{\pm} = \mp 1, \quad |c_1|_{\pm} = |c_2|_{\pm} = \frac{1}{(1 \mp S)\sqrt{2}} \quad (6.8)$$

(множитель  $\sqrt{2}$  в знаменателе — нормировочный).

Таким образом, прежний уровень  $E = V_0$  расщепляется на два, отстоящие друг от друга на величину

$$\Delta(R) = E_+ - E_- = \frac{2(B-AS)}{1-S^2} \quad (6.9)$$

(знак  $\Delta(R)$  может быть любым).

Пользуясь указанным выше выражением для нормировочного множителя  $N$  (при  $n > 1$ ), легко получить асимптотические оценки

$$|B| \sim R^{-n} |V(R)|, \quad |A| \sim |V(R)|, \quad S \sim \left( \frac{a}{R} \right)^n. \quad (6.10)$$

Отсюда следует, что  $|\Delta(R)|$  убывает с ростом  $R$  быстрее, чем  $\psi_1(R)$ , что, в сущности, и оправдывает весь этот расчет.

Формально  $\Delta(R) \neq 0$  при любом  $R$ . Однако, как уже отмечалось в п. 4, «дискретные» уровни, расположенные выше уровня Ферми, всегда имеют конечную собственную ширину. Пусть суммарная собственная ширина рассматриваемых уровней есть  $\delta$ . Как и в п. 4, определим корреляционную длину,  $R_0$ , равенством

$$|\Delta(R_0)| = \delta. \quad (6.11)$$

Тогда при  $R > R_0$  рассматриваемые уровни следует считать изоэнергетическими. Видим, что при

$$a \ll R_0 < n_t^{-1/2} \quad (6.12)$$

существует интервал значений  $R$ , в котором

- а) расщепление уровней пренебрежимо мало,
- б) можно выделить две асимптотические области:

$$a < r \ll \frac{R}{2}, \quad \frac{R}{2} < r < R - a \quad (6.13)$$

и

- в) влияние остальных ям несущественно.

Нетрудно обобщить эти выводы и на случай нескольких ям. Таким образом, в условиях (6.12) и в пренебрежении влиянием полного случайного поля представление о степенной локализации имеет буквальный смысл, но вряд ли может объяснить характер явлений переноса, наблюдаемых <sup>74</sup>, когда уровень Ферми попадает в область  $E > E_c$ .

Действительно, в рассматриваемых условиях состояния со степенной локализацией заполняют лишь очень узкую полосу энергий около  $E_c$ .

Ситуация, однако, меняется при отказе от условий (6.12) и/или при учете влияния той части случайного поля,  $U_1$ , которая не сводится к сумме

$$V = \sum_i V_i(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i); \quad (6.14)$$

индекс  $i$  нумерует здесь центры степенной локализации, расположенные в точках  $\mathbf{R}_i$ . Действительно, посмотрим сначала, что получается, если, все еще пренебрегая слагаемым  $U_1$  в потенциальной энергии электрона, обра-

таться к случаю достаточно большой концентрации ям вида  $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i)$ , когда  $n_t^{-1/2} \ll a$  (и тем более  $n_t^{-1/2} < R_0$ ). Здесь надо рассматривать задачу об электроде в поле (6.14) и соответственно искать волновую функцию в виде

$$\psi = \sum_i c_i \psi_i, \quad (6.15)$$

где суммирование ведется не по двум, а по всем ямам рассматриваемого типа; функции  $\psi_i$  имеют тот же смысл, что и в случае (6.4).

Система уравнений для коэффициентов  $c_i$  может оказаться не проще исходного уравнения Шредингера. Однако результат, нас интересующий, ясен без вычислений: поскольку в рассматриваемых сейчас условиях асимптотических областей (6.13) нет, рассуждения, которые привели нас к выводу о единственном собственном значении энергии,  $E = E_c$ , становятся несостоятельными. В частности, эффектом отталкивания уровней пренебречь нельзя, и он, в сочетании с обычными соображениями о малой вероятности попадания близких по глубине и форме ям в близкие области пространства, должен привести к разбросу уровней в конечной (по крайней мере!) области значений энергии.

Эти выводы еще более усиливаются, если принять во внимание и слагаемое  $U_1$  в потенциальной энергии электрона. Чтобы представление об отдельной потенциальной яме сохранило смысл, здесь нужно не только неравенство (6.3), но и условие достаточно медленного, в среднем, изменения случайного поля в пространстве: характерная длина, на которой заметно изменяется функция  $U_1(r)$ , должна быть велика по сравнению с  $R$  и  $n_t^{-1/2}$ . В противном случае асимптотические области (6.13) ни при каких значениях  $an_t^{-1/2}$  и  $aR^{-1}$  выделить нельзя. Здесь, по-видимому, следует ожидать возникновения обычного <sup>23</sup> всюду плотного энергетического спектра, а представление о степенной локализации можно сохранить лишь в несколько условном смысле: речь идет о состояниях с волновыми функциями, которые обладали бы асимптотикой (6.2), если бы было где на нее выйти. Фактически, однако, здесь получается нечто вроде «ткани» из волновых функций, охватывающей весь образец.

Вместе с тем основная идея Каве и Мотта <sup>75</sup> остается в силе: существует область энергий электрона, которой соответствуют бестоковые состояния с волновыми функциями неэкспоненциального типа. Какова будет температурная зависимость статической электропроводности, связанной с этими состояниями, пока не вполне ясно. Очевидно, однако, что сильной зависимости, характерной для прыжковой проводимости привычного типа, здесь ожидать не приходится.

Другая трактовка электронных состояний с энергиями выше  $E_c$  была предложена И. П. Звягиным <sup>205</sup>. В его работе была предложена простая интерполяционная формула для функции  $\beta(g)$ , охватывающая оба предельных случая, указанные в п. 3. Решение уравнения (2.7) с этой функцией в правой части привело к выводу об экспоненциальной локализации всех электронных состояний при  $d = 2$ . Существует, однако, критическая энергия,  $E_c$ , выше которой длина локализации очень быстро растет с энергией. Когда эта длина становится сравнимой с размерами образца, соответствующие состояния становятся практически делокализованными. По-видимому, в смысле ответа на вопрос, поставленный в начале настоящего параграфа, эта идея не хуже представления о степенной локализации. Вместе с тем к ней также относятся и сделанные выше замечания о фактическом отсутствии асимптотических областей в материале с не слишком малой концентрацией центров локализации и/или со случайным полем общего типа.

## II. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ФИЗИКЕ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

### 7. Введение

Многоэлектронная задача в физике неупорядоченных систем имеет два аспекта. Во-первых, речь идет об учете взаимодействия между делокализованными носителями заряда. Довольно давно уже отмечалось<sup>82,83</sup>, что в присутствии случайного поля роль межэлектронного взаимодействия должна возрасти по сравнению с тем, что имеет место в идеальном кристалле. Действительно, в последнем случае совместное действие законов сохранения энергии и квазиимпульса заметно ограничивает вероятность электрон-электронного рассеяния — настолько, что вблизи поверхности Ферми она становится сколь угодно малой (чем, собственно, и обосновывается само представление о поверхности Ферми). В неупорядоченном силовом поле, однако, компоненты квазиимпульса уже нельзя рассматривать как «хорошие» квантовые числа, т. е. закон сохранения квазиимпульса не имеет места и, следовательно, указанные выше ограничения отпадают.

Соответственно становится актуальным исследование влияния межэлектронного взаимодействия на кинетические и другие характеристики системы делокализованных носителей заряда. Эта задача кратко рассматривается в п. 8.

Во-вторых, весьма существенной может оказаться роль взаимодействия между локализованными носителями заряда. Это обстоятельство хорошо известно в физике кристаллических слаболегированных полупроводников<sup>24</sup>: кулоновское отталкивание может сделать энергетически невыгодной локализацию двух электронов вблизи одного и того же атома примеси — если только при этом не выигрывается энергия химической связи или энергия деформации (в частности, поляризации) атомной матрицы. Последняя оговорка существенна: указанные только что эффекты могут радикально изменить ситуацию, разрешив, например, локализацию до трех лишних электронов на атомах золота и меди в кристаллическом германии. Более того, результирующая потенциальная энергия взаимодействия электронов может оказаться отрицательной, т. е. электроны в твердом теле могут испытывать не взаимное отталкивание, а притяжение \*)<sup>84-87</sup>. В последние годы серьезное внимание привлеч к себе еще один эффект, обусловленный взаимодействием между электронами. Он состоит в существенном изменении плотности состояний вблизи уровня Ферми, коль скоро последний располагается в области энергий, занятой дискретными уровнями («кулоновская щель»). К вопросам, связанным с этим эффектом, мы обратимся в п. 9.

### 8. Взаимодействие между делокализованными электронами или только рассеяние на примеси?

Количественное исследование роли взаимодействия между делокализованными электронами в не вполне упорядоченной системе было, по-видимому, с должной полнотой впервые выполнено в работах<sup>88-90</sup> (для случая  $d = 3$ ). В них было изучено поведение вырожденного газа электронов, взаимодействующих друг с другом и испытывающих упругое рассеяние на точечных структурных дефектах (примесях); силы взаимодействия между

\*) Этот эффект может иметь место и для свободных электронов. Он хорошо известен в теории сверхпроводимости. В случае локализованных электронов он, однако, может оказаться гораздо более сильным, проявляясь и в области сравнительно высоких температур.



электронами и примесями предполагались короткодействующими \*). Рассеяние на примеси считалось слабым в смысле обычного условия

$$k_F l_p \gg 1, \quad (8.1)$$

где  $l_p$  — соответствующая длина свободного пробега по импульсу, а  $k_F$  — фермиевское волновое число. Вместе с тем значения  $l_p$  и  $\tau$  — соответствующего времени свободного пробега — предполагались все же не слишком большими, такими, чтобы за характерное время межэлектронного взаимодействия электроны успевали многократно рассеяться на примеси. Это означает, что, помимо (8.1), должны были выполняться неравенства

$$ql \ll 1, \quad q_0 \tau \ll 1, \quad (8.2)$$

где  $\hbar q$  и  $\hbar q_0$  — импульс и энергия, переданные в одном акте неупругого рассеяния электрона на электроны \*\*).

В условиях (8.2) имеет место интерференция двух механизмов рассеяния. В результате возникают поправки к плотности состояний, электронной теплоемкости, удельному сопротивлению и другим электронным характеристикам вещества. Эти поправки зависят от температуры (при  $T \ll \hbar/\tau$ ) и, в случае удельного сопротивления, от частот внешнего поля,  $\omega$  (при  $\omega \tau \ll 1$ ).

В работе <sup>91</sup> результаты Альтшулера и Аронова были обобщены на случай  $d = 2$  (в предположении, что имеет смысл говорить о делокализованных электронах). Оказалось, что температурная поправка к проводимости дается той же формулой (3.1) с другим численным множителем перед логарифмом: вместо  $e^2/2\pi^2\hbar$  появляется выражение

$$\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} [1 - F(n)], \quad (8.3)$$

где  $n$  — концентрация делокализованных электронов, а

$$F = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi [1 + 2k_F \kappa^{-1} \sin \frac{\varphi}{2}]^{-1};$$

здесь  $k_F$  — то же, что и в формуле (8.1),  $\kappa^{-1}$  — радиус экранирования. Поскольку для вырожденного газа  $k_F \sim n^{1/2}$ , а  $\kappa \sim n^{1/4}$  <sup>129</sup>, при достаточно большой концентрации электронов  $F \rightarrow 0$  и в отсутствие рассеяния с переворотом спина даже множители оказываются одинаковыми \*\*\*). Таким образом, возникает вопрос: что же фактически подтверждают экспериментальные данные <sup>62,63</sup>? Детальный расчет численного коэффициента в формуле (3.1) (и ей аналогичной) неизбежно связан с использованием каких-то аппроксимаций. Поэтому удобнее обратиться к исследованию других эффектов — магнетосопротивления и эффекта Холла <sup>93,95</sup>. В присутствии магнитного поля с индукцией  $\mathcal{H}$  в задаче появляется еще одна характерная длина,  $L_{\mathcal{H}} = (\hbar c/\mathcal{H}e)^{1/2}$ , в результате чего формула для  $\delta\sigma$  модифицируется. Общее выражение для  $\delta\sigma$  оказывается несколько громоздким, однако оно упрощается, если длина  $L_{\mathcal{H}}$  сравнима с длиной образца,  $L$ , или меньше ее <sup>95</sup>. Тогда (при  $l_1 > L$ ) получается прежняя формула (3.1) с заменой длины

\*) По-видимому, последнее ограничение не играет принципиальной роли <sup>90</sup>. Оно лишь упрощает выкладки, позволяя отождествить транспортное время релаксации (время свободного пробега) со временем ухода электронов из состояния с заданным импульсом.

\*\*) Формально это означает, что вершинную часть, описывающую межэлектронное взаимодействие, надо перенормировать на предмет учета примесного рассеяния. При этом она становится зависящей от  $q$  и  $q_0$ .

\*\*\*) Простой вывод этого результата можно найти в работе <sup>92</sup>.

образца на

$$L_D = (L^{-2} + L_{\mathcal{B}}^{-2})^{-1/2}. \quad (8.3')$$

Очевидно, это означает возникновение отрицательного магнетосопротивления в любом, даже слабом, магнитном поле \*). Существенно, что в теории, основанной на представлении о локализации электронов, роль магнитного поля состоит во влиянии его на орбитальное движение носителей заряда <sup>96</sup>. Это означает, что под  $\mathcal{B}$  в выражении для  $L_{\mathcal{B}}$  следует понимать компоненту магнитной индукции, нормальную к плоскости образца.

Модификация формулы типа (3.1) происходит и в теории, во главу угла которой положен учет взаимодействия между электронами: множитель  $1 - F$  заменяется на  $1 - F/2$  (согласно <sup>97</sup> этот результат принадлежит Ли и Рамакришнану). Здесь, однако, эффект связан с влиянием магнитного поля на спин электрона и замечен лишь при  $g\beta\mathcal{B} \gg T$  ( $g$  — гиромагнитное отношение,  $\beta$  — магнетон Бора). Сверх того, этот эффект не зависит от ориентации вектора  $\vec{\mathcal{B}}$ . Таким образом, исследуя магнетосопротивление образца, можно выяснить, какой из двух рассматриваемых механизмов играет главную роль.

Ту же возможность дает и исследование эффекта Холла. Согласно <sup>98</sup> в теории, основанной на представлении о локализации электронов, поправка к стандартной формуле для постоянной Холла,  $R$ , не возникает, а холловская подвижность логарифмически уменьшается с понижением температуры. С другой стороны, взаимодействие между электронами приводит <sup>91</sup> к появлению поправки

$$\frac{\delta R}{R} = 2 \frac{\delta r}{r},$$

где  $r$  — сопротивление образца; при этом с понижением температуры холловская подвижность логарифмически возрастает.

В обоих случаях роль температуры может играть и электронная температура. Это позволяет воспользоваться для разграничения двух исследуемых механизмов исследованием зависимости кинетических коэффициентов как от магнитного, так и от электрического полей <sup>99</sup>.

Экспериментальные данные <sup>97,99</sup>, полученные в опытах с инверсионными слоями при температуре  $T \approx 85$  мК и магнитной индукции в интервале от нуля до  $\approx 1$  Тл, по-видимому, указывают на существование обоих механизмов, обуславливающих логарифмическую зависимость типа (3.1). В сравнительно слабых магнитных полях (до  $\mathcal{B} \approx 0,1$  Тл) доминирует эффект локализации, при дальнейшем увеличении магнитной индукции происходит известная делокализация электронов, и главную роль начинает играть взаимодействие между ними.

## 9. Проблема кулоновской щели

Задача о влиянии межэлектронного взаимодействия на энергетический спектр, термодинамику и кинетику локализованных носителей заряда в неупорядоченных полупроводниках стала привлекать к себе внимание с начала семидесятых годов <sup>105–107</sup>. В дальнейшем она изучалась в интересующем нас аспекте в работах <sup>108–127</sup>. Суть дела состоит в том (см. <sup>23</sup>, п. II. 16),

\*) В сильном магнитном поле может появиться еще дополнительный эффект <sup>100</sup>. Действительно, пусть магнитная длина  $L_{\mathcal{B}}$  значительно меньше, чем характерная длина, на которой в среднем заметно изменяется случайное поле. Тогда на электрон, магнитно локализованный в области с линейными размерами порядка  $L_{\mathcal{B}}$ , сила со стороны случайного поля практически действовать не будет.

что при наличии локализованных состояний акцепторного и донорного типов кулоновское притяжение между локализованными электронами и дырками может привести к явлению, в известной мере аналогичному обычной экситонной неустойчивости (рис. 5, 6). Очевидно, неустойчивость относительно спонтанного возникновения пар «связанный электрон — связанная дырка» (см. рис. 6) должна привести к перестройке энергетического спектра системы: в результате кулоновского взаимодействия плотность состояний,  $\rho(E)$ , изменится так, чтобы указанная неустойчивость не могла возникнуть. Именно, должно резко уменьшиться значение  $\rho(E)$  вблизи

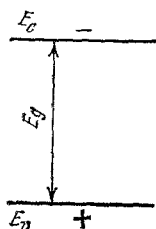


Рис. 5. Экситонная неустойчивость в кристалле.

Если энергия связи электрона и дырки  $W_B > E_g$ , то становится энергетически выгодным самопроизвольное образование электронно-дырочных пар со связыванием их в экситоны.

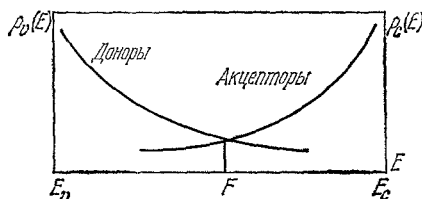


Рис. 6. Неустойчивость, ведущая к образованию кулоновской щели.

При  $T \rightarrow 0$  уровни акцепторного (донорного) типа, расположенные выше (ниже) уровня Ферми, заполнены дырками (электронами); эти состояния энергетически нейтральны. Один из типов возбуждения системы состоит в перебросе электрона с донора (при  $E = E_1 < F$ ) на акцептор (при  $E = E_2 > F$ ). Если энергия взаимного притяжения возникающих при этом «лишнего» электрона на акцепторе и дырки на доноре больше разности «одноэлектронных» энергий,  $E_2 - E_1$ , то самопроизвольное образование таких пар становится энергетически выгодным.

энергии  $E = F_0$  — уровня Ферми при абсолютном нуле температуры \*). Об этом и принято говорить как о возникновении кулоновской щели — области с резко пониженной плотностью состояний <sup>108</sup>.

Согласно работам <sup>108,111,112,117,120,121</sup> и <sup>113, 115,116</sup> при  $T = 0$  плотность состояний, вычисленная с учетом взаимодействия между электронами, обращается в нуль при  $E = F_0$ , но при значениях  $E$ , сколь угодно близких к  $F_0$ , функция  $\rho(E)$  уже отлична от нуля («мягкая щель» <sup>112</sup>). С другой стороны, в работах <sup>106,109,119</sup> величина  $\rho(E)$  получилась хотя и уменьшенной по сравнению с тем, что было бы в пренебрежении взаимодействием между электронами, но все же конечной. По-видимому, различие результатов связано с различной трактовкой случайного характера как «одноэлектронных» энергий, так и расстояний между центрами локализации; полное согласие здесь еще не достигнуто.

В трехмерной системе сглаженная (в смысле <sup>23</sup>) плотность состояний,  $\rho(E)$ , при  $E \rightarrow E_0$  аппроксимируется выражением <sup>112,113 \*\*</sup>)

$$\rho(E) = \frac{1}{2} \rho''(E) (E - F_0)^2 + \dots \quad (9.1)$$

Это, видимо, подтверждается и численным расчетом <sup>126</sup>.

\*) Здесь и в дальнейшем мы употребляем термин «плотность состояний» в смысле точного многоэлектронного его определения (см. <sup>23</sup> и приложение II). При этом энергетический аргумент  $E$  не обязательно совпадает с какой-либо «одноэлектронной» энергией.

\*\*) Разумеется, запись плотности состояний в таком виде отнюдь не означает непрерывной аналитичности ее как функции  $E - F_0$ , даже если добавить в правую часть (9.1) еще константу <sup>119</sup> или несколько следующих членов разложения <sup>115</sup>. Предполагается лишь возможность такой аппроксимации  $\rho(E)$  в области  $E \approx F_0$ , но отнюдь не возможность разложения плотности состояний в абсолютно сходящийся ряд по степеням  $(E - F_0)$ .

Отметим, однако, что этот результат, скорее всего, носит модельный характер. С другой стороны, вывод о равенстве нулю величины  $\rho(F_0)$  получен<sup>113, 115</sup> без каких-либо предположений модельного характера. Существенно было лишь то, что в конденсированной среде электрическое поле неизбежно экранируется, например, за счет пространственного перераспределения делокализованных или локализованных носителей заряда. В связи с этим следует заметить, что к учету экранирования можно подходить двояко.

Во-первых, можно, вычисляя, например, потенциал точечного заряда, формально просуммировать все диаграммы, для которых обычные петли играют роль скелетных. Этот подход, принятый в работах<sup>113, 115</sup> и в книге<sup>23</sup>, по-видимому, удобен при доказательстве общих теорем; в конкретных расчетах, однако, он может оказаться неэффективным, если не ограничиваться той или иной формой теории возмущений.

Во-вторых, можно явно решать обычное самосогласованное уравнение Пуассона, в правой части которого фигурирует объемная плотность заряда, сама зависящая от искомого потенциала. Такой подход, вероятно, полезен при численных расчетах, однако, будучи по сути дела приближенным, он может привести к излишним осложнениям в рассуждениях общего характера. Какой из двух указанных подходов выбрать в той или иной задаче — вопрос удобства.

Возникновение кулоновской щели, естественно, должно сказаться на термодинамических и кинетических характеристиках рассматриваемой системы электронов. Обратимся сначала к термодинамике.

Хорошо известно, что термодинамические характеристики вещества можно найти, задавая число частиц как функцию температуры, магнитной индукции и других величин такого типа. С другой стороны, справедлива общая формула<sup>23</sup>

$$\frac{N}{V} = \int \rho(E) n_F(E) dE, \quad (9.2)$$

где  $V$  — объем системы,

$$n_F = \left[ \exp \left( \frac{E - F}{T} \right) + 1 \right]^{-1}$$

— функция Ферми, а сглаженная плотность состояний,  $\rho(E)$ , дается общей формулой

$$\rho(E) = \frac{2}{V} \langle \text{Sp Im } G_{\mathbf{r}}(E) \rangle \equiv \rho(E, T, F). \quad (9.3)$$

Через  $G_{\mathbf{r}}$  здесь обозначен фурье-образ запаздывающей одночастичной функции Грина, а угловые скобки указывают на необходимость усреднения по случайному полю.

Формулы (9.2), (9.3) — точные. Они справедливы для любой системы взаимодействующих частиц и не связаны с какими бы то ни было предположениями модельного характера, классификацией элементарных возбуждений в системе и т. д. Использование их в конкретных задачах может, однако, встретиться с серьезными трудностями, так как плотность состояний, определяемая формулой (9.3), сама, вообще говоря, зависит от температуры и от уровня Ферми. Положение облегчается лишь в случае достаточно низких температур, когда — при определенных условиях — справедлива теорема, доказанная в статье<sup>128</sup>; для удобства доказательства ее воспроизведено в приложении II вместе с некоторыми дополнениями. Эта теорема утверждает, что с точностью не хуже, чем до величин порядка  $T^4$ , в качестве  $\rho(E)$  можно взять значение плотности состояний, вычисленное

при  $T = 0$ ; температурная зависимость числа частиц (при использовании термодинамических переменных  $T$ ,  $F$ ) определяется при этом лишь аргументом  $T$ , явно входящим в функцию Ферми. Условия применимости теоремы указаны в приложении II; в задаче о термодинамике системы с кулоновской щелью эти условия удовлетворяются. Отсюда, в сочетании с формулой (9.1), следует, что электронная теплоемкость рассматриваемой (трехмерной) системы (при постоянном объеме) есть кубическая функция температуры<sup>23, 115, 116</sup>:

$$c_v \sim T^3. \quad (9.4)$$

Отметим, что этот вывод основан лишь на одном предположении модельного характера — формуле (9.1).

С другой стороны, в работе<sup>125</sup> для теплоемкости при низких температурах была получена другая зависимость:

$$c_v \sim T |\ln T|^{-1/2}. \quad (9.5)$$

При этом использовалась формула

$$\rho(E) \sim \left( \ln \frac{\text{const}}{E - F_0} \right)^{-1}, \quad (9.6)$$

полученная авторами с помощью их самосогласованного уравнения для плотности состояний \*) (наши обозначения не совпадают с использованными в<sup>125</sup>). Входить здесь в подробное обсуждение этого уравнения, видимо, преждевременно (предварительная оценка дана самими авторами<sup>125</sup> в цитированной статье). Следует, однако, заметить, что даже в рамках этого уравнения вывод формулы (9.6) кажется не вполне свободным от возражений. Одно из них состоит в следующем. В работе<sup>125</sup> сначала вводится вероятность,  $F(\mathbf{r}, \omega)$ , образования «парного» возбуждения, т. е. вероятность того, что в интервале  $d\mathbf{r}_1$  около точки  $\mathbf{r}_1$  имеется узел, занятый электроном, а в интервале  $d\mathbf{r}_2$  около точки  $\mathbf{r}_2$  — пустой узел, причем энергия  $\omega$ , необходимая для перевода электрона со второго узла на первый, считается заданной. Затем исследуется взаимодействие таких пар («дипольных возбуждений» — по терминологии<sup>125</sup>), для чего пишется самосогласованное уравнение для функции  $F(\mathbf{r}, \omega)$ , где  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ . Последняя при этом неявно отождествляется с условной вероятностью возникновения пары возбуждений с параметрами  $\mathbf{r}'$  и  $\omega'$  на расстоянии  $s$  от начала координат, если вблизи него расположена пара, указанная выше. Известно, однако, что указанная условная вероятность отличается от  $F(|\mathbf{r}, \omega|)$  множителем — корреляционной функцией. Таким образом, последняя в работе<sup>125</sup> считается константой. Сохранится ли сингулярность (9.6) (и, следовательно, (9.5)) при отказе от этого предположения, вместе с учетом неизбежного экранирования взаимодействия между диполями?

Экспериментальная ситуация пока не вполне ясна. С одной стороны, кубическую зависимость (9.4), может быть, нелегко выделить на фоне теплоемкости атомной матрицы; с другой стороны, экспериментальных указаний на сингулярность вида (9.5), насколько известно автору обзора, пока (декабрь 1981 г.) не появлялось.

Переходя к роли кулоновской щели в кинетике, заметим прежде всего, что в стандартной теории прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка существенно предполагается, что плотность состояний на уровне Ферми отлична от нуля. При этом температурная зависимость прыжковой

\*) Аналогичный результат был получен в работе<sup>136</sup> численным методом. К сожа- лению, в силу принятых в этой работе неизбежных аппроксимаций степень достоверности выполненной там экстраполяции не вполне ясна. Не вполне ясна также связь исследованной там плотности состояний с фигурирующей в формуле (9.2).

проводимости,  $\sigma_h$ , дается выражением

$$\sigma_h \sim \exp \left[ - \left( \frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right], \quad (9.7)$$

где «температура Мотта»,  $T_0 \sim \rho^{-1} (F)$  (см. <sup>23</sup>, п. IV.10; при достаточно низкой температуре здесь можно заменить  $F$  на  $F_0$ ). В условиях (9.1) стандартная перколяционная процедура приводит <sup>107, 111, 126, 131</sup>, вместо (9.7), к соотношению

$$\sigma_h \sim \exp \left( - \left( \frac{T'_0}{T} \right)^{1/2} \right), \quad (9.8)$$

где  $T'_0 \neq T_0$ .

В работах <sup>110, 119, 123, 127</sup> отмечалось, однако, что кроме изменения плотности состояний может играть роль и другой фактор — коррелированное перемещение сразу многих электронов. Можно выделить два типа таких прыжков.

Во-первых, когда электрон совершает прыжок между двумя центрами локализации (атомными узлами), вблизи начальной и конечной точек происходит и перераспределение других электронов в пространстве. Обычно об этом говорят как о поляронном эффекте, имея в виду, что происходят «поляронные», а не «чисто электронные» прыжки\*). Согласно Мотту <sup>122</sup> при этом вновь получается формула (9.7) с прежним значением  $T_0$ , но с уменьшенным (и зависящим от температуры) предэкспоненциальным множителем.

Во-вторых, может иметь место каскадный процесс <sup>123, 127</sup>, представляющий собой совокупность одновременно происходящих «однополяронных» прыжков. Согласно Поллаку <sup>127</sup> при этом температурная зависимость прыжковой проводимости оказывается степенной:

$$\sigma_h \sim T^p \quad (9.9)$$

с трудно определяемым показателем степени  $p$ .

Отметим, однако, что как Мотт, так и Поллак не пользовались плотностью состояний в форме (9.1), считая, видимо, что при  $E = F_0$  плотность состояний имеет только провал, но не нуль. Далее, как отмечалось и в самой работе <sup>123</sup>, результат (9.9) получен простой максимизацией вероятности прыжка, без учета перколяционных соображений. Все это делает теоретическую ситуацию пока что не вполне ясной. Не очень ясна и экспериментальная ситуация. Зависимость (9.8) была, по-видимому, обнаружена в работе <sup>132</sup>, а степенная зависимость — в работах <sup>133, 134</sup>. Все же для окончательной уверенности в том, что эти эффекты связаны именно с наличием кулоновской щели, хотелось бы иметь и экспериментальные данные о других характеристиках образца — электронной теплоемкости и магнитной восприимчивости, а также о температурной и частотной зависимости прыжковой проводимости на переменном токе,  $\sigma_h(\omega)$ . Согласно <sup>116</sup> здесь (при низких температурах и достаточно высоких частотах, когда можно ограничиться рассмотрением бесфононных переходов) можно ожидать следующих зависимостей:

$$\operatorname{Re} \sigma_h(\omega) \sim \sigma_0(\omega) \begin{cases} T^4, & T \gg \hbar\omega, \\ \omega^4, & T \ll \hbar\omega. \end{cases} \quad (9.10)$$

Через  $\sigma_0(\omega)$  здесь обозначена вещественная часть прыжковой проводимости на частоте,  $\omega$ , которая получилась бы в отсутствие кулоновской щели. Явные выражения для  $\sigma_0(\omega)$  хорошо известны <sup>25, 135</sup>.

\*) Видимо, если уж пользоваться здесь термином «полярон», то стоило бы добавлять к нему слово «электронный», ибо обычный полярон представляет собой, как известно, элементарное возбуждение, обусловленное взаимодействием носителей заряда с инерционной поляризацией атомной матрицы.

### III. «ХВОСТ» КОЭФФИЦИЕНТА МЕЖДУЗОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА В НЕУПОРЯДОЧЕННОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

#### 10. В в е д е н и е

О «хвосте» коэффициента поглощения («оптическом хвосте») говорят, когда имеет место поглощение фотонов с энергиями, меньшими оптической ширины запрещенной зоны,  $E_g$ . В физике слаболегированных кристаллических полупроводников при этом обычно подразумевается, что в понятие «хвост» не включаются индуцированные светом электронные переходы между дискретными уровнями и зонами проводимости или дырочной. Однако в неупорядоченном, в том числе сильнолегированном, полупроводнике спектр дискретных уровней в щели для подвижности становится, строго говоря, всюду плотным, и эта оговорка может потерять смысл.

Коэффициент поглощения света,  $\alpha$ , в области хвоста весьма часто описывается формулой, получившей название правила Урбаха:

$$\alpha = \alpha_m \exp \left( - \frac{E_g - \hbar\omega}{\overline{W}} \right), \quad (10.1)$$

где  $\overline{W}$  — параметр, не зависящий от частоты, а предэкспоненциальный множитель  $\alpha_m$  зависит от частоты сравнительно слабо.

По-видимому, впервые это соотношение было установлено эмпирическим путем в работе <sup>137</sup>, в которой исследовалось поглощение света в щелочно-галогидных кристаллах. В дальнейшем зависимость вида (10.1) многократно наблюдалась в самых различных материалах и в разных условиях опыта \*).

Согласно <sup>137</sup> в ионных кристаллах параметр  $\overline{W}$  примерно пропорционален температуре  $T$ . Этот вывод подтвердился и в ряде других работ; он оказался справедливым и в применении к кристаллам иного типа, если температура не слишком низка. Так, в сильнолегированном (и не слишком компенсированном) арсениде галлия  $p$ -типа <sup>139-141</sup> линейная температурная зависимость  $\overline{W}$  наблюдалась до  $\sim 400$  К, становясь значительно более слабой при дальнейшем понижении температуры. В сильнолегированных и компенсированных полупроводниках, а также в аморфных материалах <sup>143-156</sup> и в стеклах <sup>157-170</sup> температурная зависимость  $\overline{W}$  также не очень существенна, хотя она и бывает иногда заметна \*\*). С другой стороны, ясно видна зависимость  $\overline{W}$  от концентрации примеси <sup>142</sup>. При уменьшении ее уменьшается и  $\overline{W}$  и эффект становится очень малым. Весьма заметна также зависимость  $\overline{W}$  от условий приготовления образца <sup>143,144</sup> (в цитированных работах исследовалось поглощение света в пленках аморфного кремния). Направляется вывод, что  $\overline{W}$  уменьшается по мере уменьшения концентрации структурных дефектов в материале \*\*).

Существенная роль структурных дефектов в образовании оптического хвоста видна и из опытов по поглощению света в радиационно поврежденных материалах <sup>171,172</sup>.

В последнее время вопрос о коэффициенте поглощения света в аморфных материалах, особенно в аморфном кремнии, стал довольно актуальным

\*) Довольно полный обзор экспериментальных данных, накопленных к 1971 г., можно найти в <sup>138</sup>.

\*\*) В соответствии со сказанным во введении мы ограничиваемся минимумом литературных ссылок, и автор обзора надеется, что заинтересованные лица не предадут его за это анафеме: одно лишь перечисление фамилий заняло бы здесь не одну страницу...

в связи с перспективами их применения в различных фотоэлектрических устройствах, включая солнечные батареи<sup>173</sup>. По этой причине представляется целесообразным дать здесь краткую сводку основных теоретических результатов, полученных к настоящему времени.

#### 11. Фононы и статический беспорядок

По-видимому, первая убедительная теория, позволяющая объяснить правило Урбаха в ионных кристаллах, была предложена в работе<sup>174</sup>. Идея очень проста: предполагается, что фотон поставляет лишь часть энергии, необходимой для перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости, а дефицит энергии,  $E_g - \hbar\omega$ , покрывается за счет одновременного поглощения фононов. Последовательное применение теории многофононных переходов действительно позволяет получить для  $\alpha(\omega)$  выражение, удовлетворительно аппроксимирующее формулу (10.1)<sup>174</sup>:

$$\alpha \sim \exp \left[ -\frac{E_g - \hbar\omega}{c_1 T} \left| \ln \frac{E_g - \hbar\omega}{c_2 T} \right| \right], \quad (11.1)$$

где  $c_1$  и  $c_2$  — постоянные, характеризующие энергию взаимодействия электронов с фононами и вид фононного спектра. При  $T \rightarrow 0$  эффект, естественно, исчезает ввиду исчезновения фононов, которые можно было бы поглотить. В дальнейшем идеи работы<sup>174</sup> были перенесены<sup>175</sup> и на случай оптических переходов между зоной проводимости (или валентной) и локальным уровнем, расположенным в запрещенной зоне\*).

С другой стороны, низкотемпературную часть коэффициента поглощения в сильнолегированных (компенсированных), аморфных и стеклообразных полупроводниках, равно как и зависимость его от условий приготовления образца, вряд ли можно объяснить, не принимая во внимание влияние статического беспорядка в расположении атомов на энергетический спектр электронов и дырок\*\*). Иначе говоря, надо исследовать поглощение света в случайном поле. При этом, как всегда в таких задачах<sup>23</sup>, формула для наблюдаемого на опыте коэффициента поглощения может содержать лишь величины, усредненные по всем конфигурациям случайного поля\*\*\*). Все они выражаются через корреляционные функции вида \*\*\*\*)

$$\Psi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \langle U(\mathbf{r}_1) \dots U(\mathbf{r}_n) \rangle; \quad (11.2)$$

здесь угловые скобки обозначают указанное выше усреднение, а  $U(\mathbf{r})$  есть, как и раньше, флуктуация потенциальной энергии электрона в точке  $\mathbf{r}$ :  $U = V - \langle V \rangle$ , где  $V(\mathbf{r})$  — потенциальная энергия электрона при той

\*) В последнее время появились важные работы<sup>206, 207</sup>, посвященные более подробной трактовке правила Урбаха на основе представления о многофононных переходах. Заметим, однако, что последующие замечания относятся и к ним.

\*\*) В работе<sup>158</sup> сделана попытка объяснить хвост коэффициента поглощения в стеклообразном арсениде серы влиянием нулевых колебаний атомной матрицы. В интервале энергий фононов около 0,3 эВ была удовлетворительно воспроизведена экспериментально наблюдаемая зависимость  $\alpha(\omega)$ . В этой работе, однако, речь шла о поглощении, связанном с переходами между зоной проводимости и локальным уровнем, расположенным вблизи середины щели для подвижности. Вопрос о зависимости  $\alpha$  от условий приготовления образцов при этом в значительной мере смазывается.

\*\*\*)) Далее, в этом параграфе в заметной мере воспроизводится содержание одного из разделов книги<sup>23</sup>, почему мы и опускаем подробные выводы и литературные ссылки, приведенные в цитированной книге. Вместе с тем для удобства читателя казались разумным воспроизвести здесь основные физические соображения и результаты.

\*\*\*\*)) Иногда эти функции не вводят явно, пользуясь непосредственно функцией распределения какой-либо из физических интересных величин (например, значений напряженности случайного поля). Эти два подхода, разумеется, совершенно эквивалентны.



или иной фиксированной конфигурации атомов. Заметим, что в качестве  $V(\mathbf{r})$  чаще всего фигурирует «эффективная» потенциальная энергия, остающаяся после выделения периодической части,  $V_{\text{пер}}$ , описывающей некоторую вспомогательную упорядоченную систему. В случае сильнолегированного кристаллического полупроводника  $V_{\text{пер}}$  есть просто потенциальная энергия электрона в идеальном кристалле (полученная, например в том или ином варианте одноэлектронной теории). Выбор  $V_{\text{пер}}$  для аморфного или стеклообразного полупроводника менее однозначен<sup>23</sup>. В сущности, выделяя  $V_{\text{пер}}$ , мы используем тот же прием, что и в теории поляронов<sup>176</sup>; при этом в окончательные выражения для измеряемых на опыте величин входят только величины типа эффективных масс, соответствующих задаче с потенциальной энергией  $V_{\text{пер}}$ ; их надо рассматривать как параметры теории, определяемые из опыта (подробнее см.<sup>23</sup>, п. II. 8).

Для дальнейшего существенно, что эффективная потенциальная энергия может зависеть от зонного индекса. Соответственно, вместо  $U(\mathbf{r})$  иногда пишут  $U_l(\mathbf{r})$ , где  $l$  — зонный индекс; такие же индексы появляются и у функций  $\Psi_n$ . С ситуацией такого типа мы встречаемся, например, когда случайное поле обусловлено упругими напряжениями, возникающими в атомной матрице при возникновении в ней структурных дефектов того или иного типа: потенциалы деформации для зон проводимости и валентной, вообще говоря, различны и могут иметь даже разные знаки.

В макроскопически однородной системе, рассматриваемой в этом и следующих двух параграфах, функция  $\Psi_n$  может зависеть лишь от  $n-1$  разностей  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_n$  и т. д. Особый интерес для нас будет представлять бинарная корреляционная функция случайного поля,  $\Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ , ибо только связанные с ней величины входят во все полученные до сих пор результаты. Явный вид ее (как и вид всех остальных функций  $\Psi_n$ ) зависит от природы сил, действующих на электроны, или, как говорят, от природы случайного поля; из общих соображений следует лишь, что функция  $\Psi(\mathbf{r})$  должна быть ограничена и должна убывать до нуля при  $r \rightarrow \infty$ .

В теории неупорядоченных систем до сих пор рассматривались три основных типа статических случайных полей.

а) Кулоновское поле\*). Так принято называть экранированное поле, создаваемое совокупностью точечных зарядов, случайно распределенных по образцу (с некоторой корреляцией между координатами заряженных центров или без нее). Такое поле создается, например, ионами посторонней примеси, коль скоро не играют роли сравнительно малые расстояния от них, когда ионы нельзя рассматривать как точечные заряды. Экранировка возникает при этом либо в результате пространственного перераспределения свободных или (в компенсированном образце) связанных носителей заряда, либо из-за пространственного перераспределения самих доноров и акцепторов, возникающего в процессе приготовления образца. Выражения для соответствующего радиуса экранирования,  $r_0 \equiv \kappa^{-1}$ , в ряде случаев хорошо известны<sup>24, 129, 177</sup>; впредь мы будем рассматривать  $\kappa$  просто как феноменологический параметр. Очевидно, в таком поле функция  $V$ , и следовательно  $\Psi$ , не зависит от номера зоны. Ограничимся простейшим случаем, когда ионы примеси расположены в пространстве некоррелированно, а потенциальная энергия электрона в поле отдельного иона,  $V_a$ , дается обычным дебаевским выражением

$$V_a(r) = \frac{Z_a e^2}{\epsilon r} \exp(-\kappa r); \quad (11.3)$$

\*) Во избежание недоразумений подчеркнем, что термин «кулоновское» употребляется здесь только в указанном ниже узком смысле.

здесь индекс  $a$  нумерует тип примеси,  $e$  — заряд электрона,  $Z_a$  — заряд иона в единицах  $|e|$ , а  $\varepsilon$  — статическая диэлектрическая проницаемость вещества. Полная потенциальная энергия электрона,  $V$ , дается здесь суммой выражений (11.3) по всем ионам, а для бинарной корреляционной функции получается

$$\Psi(r) = \frac{2\pi n_i^* e^2 r_0}{\varepsilon^2} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \quad (11.4)$$

где

$$n_i^* = \sum_a n_a Z_a^2 \quad (11.5)$$

есть эффективная концентрация заряженной примеси.

Кулоновским оказывается и собственное (в смысле, указанном в <sup>23</sup>, п. II. 8) случайное поле в неупорядоченных полупроводниках, в которых химическая связь имеет хотя бы частично ионный характер и имеется только ближний порядок. К числу таких материалов относятся, в частности, халькогенидные стеклообразные полупроводники — селенид и сульфид мышьяка и др. Вообще говоря, формулой (11.4) в этом случае пользоваться нельзя, так как в расположении собственных (не примесных) атомов вещества бесспорно имеется корреляция. Однако, в отличие от кристаллов, в некристаллических материалах соответствующая корреляционная длина,  $r_c$ , конечна. Если она мала по сравнению с радиусом экранирования, то в пренебрежении величинами порядка  $r_c r_0^{-1}$  мы вновь получаем формулы (11.4) и (11.5). При этом, в отличие от легированных кристаллических полупроводников, индекс  $a$  здесь нумерует химически различные типы атомов основного вещества, под  $n_a$  надо понимать концентрацию атомов данного типа, а  $Z_a$  есть соответствующая доля ионной связи.

б) Г л а д к о е   п о л е. Так называют поле любого происхождения, если оно в среднем достаточно плавно изменяется в пространстве. Именно, введем величины

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \langle U^2(\mathbf{r}) \rangle, \\ \psi_2 &= \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}'} \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}} = \langle (\nabla U)^2 \rangle. \end{aligned} \quad (11.6)$$

Физический смысл их очевиден; отметим, что в рассматриваемой нами макроскопически однородной системе они не зависят от  $\mathbf{r}$ . Обозначим, далее, через  $m$  наименьшую из эффективных масс, соответствующих указанной выше вспомогательной задаче. Тогда условие «достаточной плавности» сводится к неравенству

$$\frac{\hbar^2 \psi_2}{4m \psi_1^{3/2}} \ll 1. \quad (11.7)$$

Явный вид  $\Psi(\mathbf{r})$  здесь не играет роли; измеряемые на опыте величины выражаются только через параметры  $\psi_1$  и  $\psi_2$ .

Гладкое поле возникает, например, в условиях, когда систему точечных зарядов можно заменить непрерывным распределением заряда, т. е. перейти к постановке задачи, характерной для электродинамики Лоренца\*). Так обстоит дело, в частности, когда случайное поле создается системой хаотически распределенных в образце трехмерных протяженных дефектов

\*) Неслучайные силовые поля такого типа прекрасно известны в физике полупроводников. Они возникают едва ли не у каждого  $n$  —  $p$ -перехода, если дебаевская длина достаточно велика по сравнению с длиной волны де Бройля (в этом случае в неравенство (11.7) вместо  $\psi_1^{1/2}$  и  $\psi_2^{1/2}$  надо поставить просто потенциальную энергию электрона и модуль ее градиента).

технологического происхождения или дефектами типа кластеров, возникающих в образце (в том числе и кристаллическом) в результате облучения нейтронами<sup>178-181</sup>.

Дефекты такого типа возникают и в кристаллах<sup>213,214</sup>. По этой причине многие образцы, считавшиеся ранее довольно чистыми и «бездефектными», на самом деле могут такими и не быть. Отметим, что рассматриваемое случайное поле именно в силу своей гладкости может — в определенной области температур — не слишком сильно влиять на подвижность носителей заряда (соответствующие формулы были получены в работах<sup>215-217</sup>). Вместе с тем влияние этого поля может сказаться на более тонких эффектах, в частности — на величине оптического хвоста. В этом смысле даже многие кристаллические — и притом отнюдь не сильнолегированные — образцы придется, может быть, отнести к неупорядоченным материалам.

Таким образом, исследование эффектов, связанных с наличием гладкого случайного поля (например, обнаружение хвоста коэффициента поглощения в слаболегированном кристалле), может служить для неразрушающего контроля качества образцов. То же, как мы увидим ниже (п. 13), относится и к «чистому», т. е. не легированному водородом, фтором и т. п., аморфному кремнию.

Наконец, гладкое поле любого происхождения может появиться при наличии в расположении атомов промежуточного порядка \*)<sup>182</sup>.

Отметим, что кулоновское поле — не гладкое, каков бы ни был радиус экранирования  $r_0$ . Действительно, легко убедиться, что в случае (11.4) параметр  $\psi_2$  расходится (из-за особенности потенциала (11.3) на малых расстояниях). Формально это связано с сингулярностью вторых производных от  $\Psi$  по компонентам вектора  $\mathbf{r}$ . Бинарная корреляционная функция гладкого изотропного случайного поля может содержать только целые степени  $r^2$ .

в) Поле короткодействующих сил. Смысл названия в данном случае не требует пояснений. Случайное поле такого типа возникает, например, в результате не вполне упорядоченного — и притом случайно разупорядоченного — расположения атомов в гомеополарном материале. Рассматривая потенциальную энергию (или псевдопотенциал) электрона в случайном поле как сумму его энергий,  $V_a$ , в поле отдельных атомов, легко убедиться, что бинарная функция  $\Psi(r)$  заметно отлична от нуля, лишь если расстояние  $r$  не превышает радиуса действия соответствующих сил. Если последний значительно меньше других характерных длин задачи (например, длины световой волны, если речь идет о поглощении света, радиуса локализации электрона и т. д.), то функцию  $\Psi$  можно аппроксимировать выражением

$$\Psi(r) = \Phi_0 \delta(r) \quad (11.8)$$

(случай «белого шума»). Такая же формула при определенных условиях характеризует и поле упругих деформаций, возникающих из-за флуктуаций состава в неоднородном твердом растворе; при этом  $\Phi_0$  зависит от зонных индексов  $s, v$ . Явные выражения для параметра  $\Phi_0$  в двух указанных случаях можно найти в книге<sup>23</sup>.

Функция (11.8) — «самая сингулярная» из рассмотренных нами. Для нее нельзя определить не только параметр  $\psi_2$ , но и  $\psi_1$ ; роль последнего

\*) Несколько расплывчатый пока что термин «промежуточный порядок» определяется до сих пор более или менее интуитивным путем и означает только, что речь идет о расположении атомов, упорядоченном не в пределах одной-двух координационных сфер, но и не во всем образце, а, например, в пределах области с линейными размерами в десяток средних межатомных расстояний.

играет величина

$$\Phi_0 = \int \Psi(r) dr.$$

Заметим, что корреляционные функции кулоновского и гладкого полей характеризуются минимум двумя независимыми параметрами, из которых один определяет среднюю величину флуктуаций, а другой — радиус корреляции, т. е. длину, на которой функция  $\Psi(r)$  достаточно заметно убывает. В гладком поле это  $\psi_1^{1/2}$  и  $(\psi_1/\psi_2)^{1/2}$ , в кулоновском  $\psi_1^{1/2} = (2\pi n_0^* e^4 r_0 \varepsilon^{-2})^{1/2}$  и  $r_0$ . С другой стороны, в правую часть (11.8) входит лишь один параметр,  $\Phi_0$ . Радиус корреляции формально положен равным нулю. Последнее обстоятельство определяет особую простоту функции (11.8), пользующейся по этой причине большой популярностью у теоретиков. Есть задачи, в которых аппроксимация (11.8) допустима и вполне достаточна. Однако при изучении плотности состояний или коэффициента поглощения света вид корреляционной функции, и особенно аналитическая ее структура, влияет на результат.

## 12. Случайное поле и правило Урбаха

Частотная зависимость коэффициента поглощения света полупроводниками со случайным полем рассчитывалась в ряде работ. В таблице дана сводка результатов, полученных<sup>23</sup> в предположении, что  $E_g \gg \bar{W}$ , и в предположении взаимодействия электронов и дырок с фононами и без учета возникновения экситонов. Последний эффект в полупроводниках с кулоновским случайным полем вряд ли играет роль, ибо при большой концентрации примеси радиус экранирования оказывается небольшим; если он меньше боровского радиуса экситона (что имеет место в условиях сильного легирования), то экситон вообще не существует как стационарное состояние. В материале с гладким полем, не зависящим от номера зоны, экситоны могут существовать, если величина  $\bar{W}$  меньше энергии ионизации экситона,  $E_J$ ; в противном случае силы, действующие на электрон и дырку со стороны случайного поля, «разрывают» экситон (в указанных условиях они направлены в противоположные стороны). Когда скоро неравенство  $\bar{W} < E_J$  выполняется, величину  $\bar{W}$  следует заменить на

$$\bar{W} = \frac{\hbar^2 \psi_3}{27 m_r W_B^2}, \quad (12.1)$$

где

$$W_B = \frac{m_r e^4}{2 \varepsilon^2 \hbar^2}.$$

«Хвосту» соответствует здесь область энергий, лежащая ниже невозмущенного экситонного уровня:

$$\hbar \omega < E_g - W_B.$$

Вопрос о роли экситонов в поглощении света неупорядоченным полупроводником со случайным полем короткодействующих сил пока, насколько нам известно, с должной полнотой не исследован.

В связи с результатами, приведенными в таблице, следует сделать два замечания.

Во-первых, в кулоновском и гладком случайных полях частотная зависимость коэффициента поглощения при  $\hbar \omega < E_g$  отнюдь не воспроизводит плотность состояний,  $\rho(E)$ , как функцию энергии,  $E$ , на хвосте, образуемом ниже дна зоны проводимости или выше потолка валентной зоны, равно как и комбинированную плотность состояний (подробнее см.<sup>23</sup>,

Т а б л и ц а

Частотная зависимость коэффициента поглощения света  
в неупорядоченном полупроводнике при  $\hbar\omega < E_g$

Случайное поле	$\alpha$	$\bar{W}$
Кулоновское (без корреляции в расположении точечных зарядов)	формула (10.1)	$2,2W_B (n_i^* a_B^3)^{2/5}$ $W_B = \frac{e^2}{2\epsilon a_B}, \quad a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{m_n e^2}$
Гладкое	формула (10.1)	$\left(\frac{\hbar^2 \psi_2}{36 m_r}\right)^{1/3}, \quad m_r^{-1} = m_n^{-1} + m_p^{-1}$
Короткодействующих сил	$\sim \exp\left(-\sqrt{\frac{E_g - \hbar\omega}{\bar{W}}}\right)$	$\left(\frac{(2m)^{3/2} \Phi_{0,c,v}}{16\pi \hbar^3}\right)^2, \quad m = \sqrt{m_n m_p}$ $\Phi_{0,c,v} = (\Phi_{0,c} \Phi_{0,v})^{1/2}$

1. Через  $\epsilon$ ,  $m_n$ ,  $m_p$  обозначены, соответственно диэлектрическая проницаемость вещества и эффективные массы электронов и дырок, отвечающие вспомогательной задаче с периодическим полем. Для простоты приняты изотропные законы дисперсии; обобщение на анизотропный случай<sup>183</sup> сводится к замене  $m_n$ ,  $m_p$  некоторой комбинацией эффективных масс

2. В сильнолегированных полупроводниках хвост коэффициента поглощения может наблюдаться лишь при достаточно сильной компенсации. В противном случае вместо хвоста будет наблюдаться известный сдвиг Бурштейна — Мосса (24, п. XVIII, § 7).

3. Формула для  $\bar{W}$  в кулоновском поле получена в предположении, что  $m_n \ll m_p$ . При обратном знаке неравенства надо заменить  $m_n$  на  $m_p$ .

4. В кулоновском случайном поле коэффициент поглощения описывается формулой (10.1) лишь в области  $E_g - \hbar\omega \lesssim 2\bar{W}$ . При дальнейшем уменьшении энергии фотона зависимость  $\alpha(\omega)$  оказывается более резкой; при  $E_g - \hbar\omega \gg \bar{W}$  вместо (10.1) получается

$$\alpha \sim \exp\left(-\frac{E_g - \hbar\omega}{\bar{W}} \cdot 1,1\right)^{5/3}.$$

Результат, полученный для поля короткодействующих сил, справедлив асимптотически при  $\bar{W} \gg E_g - \hbar\omega$ .

5. Результат для гладкого поля получен в предположении, что оно гауссово<sup>23</sup>. Обобщение на негауссов случай<sup>23</sup> сводится к замене  $\psi_2$  другим параметром аналогичного типа.

гл. V). Только в материале с короткодействующими силами функции  $\rho(E)$  и  $\alpha(\omega)$  оказываются асимптотически одинакового вида, differing лишь множителями при  $\sqrt{E_c - E}$  и  $\sqrt{E_g - \hbar\omega}$ <sup>201</sup>. Отсюда явствует, что попытки непосредственно использовать данные о коэффициенте поглощения для исследования плотности состояний в щели для подвижности, к сожалению, до сих пор иногда предпринимающиеся, представляются чрезвычайно рискованными.

Во-вторых, в недавних работах<sup>184,185</sup> в модели полупроводника со случайным полем короткодействующих сил выражение вида (10.1) получено (численным методом) как для коэффициента поглощения, так и для плотностей состояний на хвостах около зон проводимости и валентной (с заменой  $E_g - \hbar\omega$  на абсолютное значение энергии в данной точке щели для подвижности, отсчитанное соответственно от дна зоны проводимости или от потолка валентной зоны). Поскольку формула, указанная в таблице, равно как и аналогичные выражения для плотностей состояний, представляет собой точную асимптотику явного аналитического выражения, следует думать, что результаты<sup>184,185</sup> справедливы лишь в некоторой ограниченной области энергий. Разумеется, это не лишает их интереса; с другой

сторон, признать эти результаты универсальными вряд ли возможно, а противопоставление их расчетам с кулоновским или гладким случайными полями, видимо, не оправдано: речь идет о системах, физически существенно различных. Отметим также, что в цитированных работах еще нет априорной оценки параметра  $\overline{W}$  (в обозначениях <sup>184,185</sup> — параметра Г).

Обобщение результатов на предмет учета взаимодействия электронов и дырок не только со случайным полем, но и с фононами, понадобилось прежде всего в задаче об оптическом хвосте в кристаллических полупроводниках <sup>186</sup>. Речь идет о материалах, в которых в отсутствие случайного поля доминировали бы не прямые переходы. Как показано в цитированных выше работах Б. Эссера, формулы, указанные в таблице для кулоновского и гладкого полей, остаются в силе и в этом случае; меняется лишь предэкспоненциальный множитель,  $\alpha_n$ , в формуле (10.1). В частности, этот множитель становится зависящим от температуры — за счет числа фононов, поглощаемых при непрямом переходе. С другой стороны, в халькогенидных стеклах наблюдается <sup>161,167,168</sup> и некоторая температурная зависимость самого энергетического параметра  $\overline{W}$ . Это потребовало обобщения теории на предмет совместного учета как влияния случайного поля, так и возможности электронных переходов с одновременным поглощением фононов. Такое обобщение было предложено в двух циклах работ <sup>186–188</sup> и <sup>189,190</sup>. В первом из них исследовались переходы между глубокими локальными уровнями, расположенными в щели для подвижности, и между этими уровнями и областями непрерывного спектра (как поглощение света, так и люминесценция). Природа случайного поля явно не специализировалась — вместо этого делались предположения о спектре дискретных уровней. Они могли быть либо связанными с какими-то врожденными дефектами, либо флуктуационными. В первом случае роль случайного поля состояла, по предположению, просто в гауссовой «размазке» пиков плотности состояний, во втором — постулировалась экспоненциальная форма плотности состояний на хвостах \*). Комбинируя эти соображения со стандартной теорией многофононных переходов в твердом теле <sup>192</sup>, авторы построили графики для температурной зависимости коэффициента поглощения света на хвосте и для частотной зависимости интенсивности люминесценции неупорядоченных полупроводников при переходах различных типов; видимо, эти результаты еще ждут сравнения с опытом.

Во втором цикле работ изучалось поглощение света в гладком и кулоновском случайных полях с одновременным испусканием произвольного числа фононов. Влияние случайного поля рассматривалось в рамках тех же приближений, что и в <sup>23</sup> (как без учета, так и с учетом экситонных эффектов); при этом в кондоновском приближении оказалось возможным воспользоваться обычной теорией многофононных переходов. В результате для коэффициента поглощения вновь получалось выражение (10.1) (в тех же условиях, что и в отсутствие многофононных переходов), но с функцией  $\overline{W}$ , зависящей от параметра тепловыделения и от температуры. Расчет доведен до конца в случае бездисперсионных оптических (или локальных) фононов, характеризуемых частотой  $\omega_0$ . Как и следовало ожидать, температурная зависимость  $\overline{W}$  тем слабее, чем меньше безразмерный (в единицах  $\hbar\omega_0$ ) параметр тепловыделения и чем больше параметр

$$b = \frac{\overline{W}}{\hbar\omega_0}.$$

\*) Такой полуфеноменологический способ учета случайного поля мог бы вызвать известное неудовольствие; великие заметить, однако, что согласно модельным расчетам <sup>184,191</sup> зависимость такого типа действительно может аппроксимировать ход плотности состояний  $\rho(E)$  в довольно широком интервале энергий  $E$ .

При достаточно низких температурах,  $T \ll \hbar\omega_0$ , эта зависимость почти исчезает, чего и следовало ожидать — фононов рассматриваемого типа почти не остается. При более высоких температурах кривая  $\overline{W}(T)$  оказывается почти линейной. Таким путем, видимо, удастся<sup>190</sup> количественно объяснить экспериментально наблюдавшуюся<sup>167,168</sup> температурную зависимость характерной энергии  $\overline{W}$  в стеклообразных селениде и сульфиде мышьяка (в соответствии со сказанным в п. 11 случайное поле в этих материалах считалось кулоновским).

### 13. Правило Урбаха в аморфном кремнии

Рассматривая экспериментальные данные, относящиеся к аморфному кремнию, следует прежде всего заметить, что вопрос об экспериментальном определении оптической ширины запрещенной зоны в неупорядоченном полупроводнике более сложен, чем в кристалле. Действительно, под оптической шириной запрещенной зоны понимается (см. <sup>23</sup>, п. II.12 и V.1) энергетическое расстояние между локальными границами зон проводимости и валентной. Однако за пределами этих границ плотность состояний отнюдь не обращается в нуль — там располагается всюду плотный спектр дискретных уровней (хвост плотности состояний), чем в конечном счете и обусловлено появление хвоста коэффициента поглощения («оптический хвост») в отсутствие фононных эффектов. Отсутствие резкой красной границы поглощения заставляет определять  $E_g$  более или менее условным способом. Иногда к оптическому хвосту относят область частот, в которой коэффициент поглощения света меньше  $10^4 \text{ см}^{-1}$ ; в других работах для определения  $E_g$  пользуются формулой

$$\alpha \sim (\hbar\omega - E_g)^2,$$

часто оправдывающейся при  $\hbar\omega > E_g$ <sup>210</sup>, экстраполируя ее к  $\hbar\omega \rightarrow E_g$ . В обоих случаях, однако, остается не вполне ясным, не приписывается ли при этом зоне проводимости (или валентной, или обеим) часть состояний, на самом деле относящихся к дискретному спектру.

Далее, сам термин «аморфный кремний» еще не характеризует образец полностью. Речь идет не только о естественной зависимости многих характеристик материала от состава и концентрации легирующей примеси и от способа приготовления, но и о том, что уже несколько лет особый интерес представляют аморфные сплавы кремния с водородом или фтором (или хлором); в последнее время говорят и о сплавах кремния с другими элементами — оловом или германием. При этом концентрация, например, водорода может составлять 20 % и более. Свойства этих сплавов и «чистого» аморфного кремния оказываются существенно различными.

Еще в ранних работах<sup>144,145</sup> было показано, что в аморфном кремнии (образца 1971 г., т. е. специально не легированном) хвост поглощения наблюдается или не наблюдается в зависимости от условий приготовления. При этом первая возможность реализовалась, как правило, в недостаточно долго (в течение нескольких часов) отжигавшихся образцах, а при более длительном отжиге исчезала. Это естественно приводило к выводу о том, что поглощение фотонов с частотой  $\omega \leq E_g/\hbar$  есть не «внутреннее» свойство аморфного кремния, а свойство образца с теми или иными дефектами структуры. В более поздних работах (см., например, <sup>146-156</sup>), посвященных изучению сплава аморфного кремния с водородом, поглощение света в этой области частот регистрировалось регулярно и при различных условиях приготовления. В образцах, содержащих водород, но не легированных специально бором или фосфором, логарифм коэффициента поглощения,  $\alpha$ , ока-

зывается почти линейной функцией частоты (т. е. оправдывается формула (10.1) в интервале значений  $\alpha$  от  $\lesssim 10^4 \text{ см}^{-1}$  до  $\approx 1 \text{ см}^{-1}$  (это соответствует энергиям фотонов от  $E_g \approx 1,7 \text{ эВ}$  до  $\approx 1,3 \text{ эВ}$ ). При этом значение  $\bar{W}$  меняется в пределах от  $\approx 0,05 \text{ эВ}$  до  $\approx 0,09 \text{ эВ}$  — в зависимости от условий приготовления пленки (в частности, от температуры подложки, поддерживавшейся в процессе нанесения пленки из тлеющего разряда, и от температуры последующего отжига). Вместе с тем наиболее часто употребляемое значение  $\bar{W} \approx 0,06 \text{ эВ}$  \*) получается и для пленок, полученных напылением. Таким образом, пока не вполне ясно, от каких именно условий приготовления зависит  $\bar{W}$  \*\*). В связи с этим следует заметить, что эта характеристическая энергия лишь слабо зависит от концентрации водорода. Естественно возникает мысль, что основную ответственность за образование оптического хвоста несет случайное поле, связанное не с водородом самим по себе, а со структурными дефектами технологического происхождения, в том числе, может быть, и неточечными, постоянно и устойчиво возникающими в процессе формирования пленки. Соответственно, вряд ли может вызвать удивление экспериментально установленное в цитированных работах соотношение между величинами  $E_g$  и  $\bar{W}$ : первая линейно уменьшается с увеличением последней. Одна из возможных причин этого указана в начале настоящего параграфа: при возрастании плотности состояний на хвосте возрастает и опасность приписать их, например, зоне проводимости. Существенно при этом, что характеристическая энергия, определяющая плотность состояний на хвосте, отличается от  $\bar{W}$  только множителем, либо не зависящим от эффективной концентрации дефектов (случай короткодействующих сил), либо зависящим от нее лишь очень слабо. Так, в гладком поле, а также в кулоновском поле с корреляционной функцией (11.4) соответствующая характеристическая энергия есть  $\psi_1^{1/2} = [\Psi(0)]^{1/2}$ . Пользуясь выражением для  $\bar{W}$  из таблицы, легко убедиться, что в случае (11.4) мы имеем

$$\psi_1^{1/2}/\bar{W} \sim (r_0 a_B^{-1})^{1/2} (n_t^* a_B^3)^{1/10} \frac{V 2\pi}{1,1}.$$

Радиус экранирования,  $r_0$ , также может зависеть от  $n_t^*$ . При этом, в зависимости от механизма экранирования, в правой части последнего соотношения получаются разные степени  $n_t^*$ , но ни одна из них не превышает по модулю  $3/20$ . Аналогичная ситуация возникает и в гладком поле.

При всей привлекательности этой точки зрения она все же, по-видимому, не единственно возможная. Дело в том, что пленки аморфного кремния с водородом оказываются пространственно неоднородными в масштабах, которые нельзя отнести к микроскопическим <sup>193-198</sup>. Они могут не только содержать внутренние полости и/или неоднородности, по форме напоминающие гальки (с линейными размерами около  $1000 \text{ \AA}$ ), но и обладать «колонной» структурой: пленка, полученная по методу тлеющего разряда, пронизывается насквозь колоннами с поперечными линейными размерами

\*) В работе <sup>154b</sup> указано значение  $\bar{W} = 0,06 \pm 0,01 \text{ эВ}$  (пленка получалась осаждением из тлеющего разряда).

\*\*) При сравнительно низкой ( $100^\circ \text{C}$ ) температуре подложки в условиях приготовления образца правило Урбаха соблюдается в более узкой области энергий — от  $1,7 \text{ эВ}$  до  $\approx 1,3-1,4 \text{ эВ}$  (в зависимости от температуры отжига); последней энергии соответствует  $\alpha \approx 10^2 \text{ см}^{-1}$ . Далее начинается более плавная зависимость — имеется широкая полоса поглощения, простирающаяся иногда (в зависимости от температуры отжига) до  $0,9 \text{ эВ}$ . Согласно <sup>154a</sup> коэффициент поглощения света в этой полосе связан с концентрацией неспаренных спинов, определяемой в опытах по электронному парамагнитному резонансу (она может достигать  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ ). Видимо, это означает, что в данных условиях приготовления водород блокирует не все «болтающиеся связи».



порядка 10 мк. Возможна и более сложная структура неоднородностей, но принципиально существенно лишь одно: аморфный кремний с водородом представляет собой существенно двухфазную систему, причем пространственное распределение областей той или иной фазы в известной мере случайно. Концентрация водорода,  $n_H$ , в этих двух фазах оказывается различной<sup>196</sup>, пока не вполне ясно, в какой мере. Пусть, однако, в одной из фаз значение  $n_H$  достаточно велико — настолько, что, несмотря на малую степень ионности связи Si — H, становится существенным кулоновское случайное поле, возникающее из-за беспорядочного распределения указанных связей в пространстве. Выражение для  $\bar{W}$ , указанное в таблице, может оказаться в этом случае довольно неточным, ибо возможность пренебречь корреляцией в расположении связей Si — H в лучшем случае неочевидна. Для ориентировки попробуем все же ей воспользоваться. В молекуле SiH<sub>4</sub> эффективный заряд атома H составляет  $-0,05 |e|$ , а атома кремния — соответственно  $0,20 |e|$ <sup>199</sup>. В конденсированной среде эти значения могут несколько измениться, но вряд ли настолько, чтобы это имело смысл принимать во внимание при столь ориентировочной прикидке. В качестве боровского радиуса  $a_B$  возьмем «кристаллическое» значение  $a_B = 1,5 \cdot 10^{-7}$  см; заметим, что в формулу для  $\bar{W}$  входит  $a_B^{1/5}$ , т. е. численный коэффициент здесь не играет особой роли. Тогда легко убедиться, что значение  $\bar{W} = 0,06$  эВ получается, если концентрация связанного водорода составляет примерно  $3 \cdot 10^{22}$ ,  $2 \cdot 10^{22}$  и  $1,5 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup>, если речь идет соответственно о моногидридных (Si — H), дигидридных (Si — H<sub>2</sub>) и тригидридных (Si — H<sub>3</sub>) группах. Первое из этих значений соответствует, по-видимому, сплаву Si : H с 20 атомными процентами водорода. Заметим, что если мысленно увеличить концентрацию водорода в пять раз, то  $\bar{W}$  возрастет всего в 1,9 раза. Отсюда явствует, что найденное выше значение  $\bar{W}$  не так далеко от предельно достижимого в рассматриваемом материале. Если (что кажется вероятным) образование таких связей энергетически выгодно, то концентрация водорода в данной фазе может оказаться лишь слабо зависящей от средней, измеряемой на опыте концентрации водорода в данном образце.

Видимо, как исследование природы и роли устойчиво получающихся структурных дефектов, так и тщательное рассмотрение двухфазной системы заслуживают со стороны теоретиков более серьезного внимания, чем им до сих пор уделялось. Вместе с тем следует указать еще на одно обстоятельство, которое возникает в связи с оптикой пространственно неоднородного материала. Дело в том, что как выражения, указанные в таблице, так и стандартные феноменологические формулы электродинамики, используемые при обработке экспериментальных данных по поглощению света, получены в рамках задачи о распространении света в макроскопически однородной среде. Из сказанного выше явствует, что в применении к пленкам аморфного кремния это предположение не всегда оправдано. В пределах каждой фазы, по-видимому, еще можно использовать формулы таблицы, но электродинамическую часть задачи нужно пересмотреть. Такая попытка была недавно предпринята в работах<sup>55</sup> и<sup>200</sup> в связи с задачей о поглощении света в пленках  $a$  — Si : H с колонной структурой. Суть дела ясна из рис. 7, где такая пленка схематически изображена в плане. Заштрихованные кружки — торцы колонн, для простоты предполагаемых цилиндрическими. Согласно<sup>198</sup> колонны состоят из «настоящего» аморфного кремния с водородом, а между ними находится среда не вполне ясного состава («ткань»). Видно, что мы имеем дело, в сущности, с системой случайно распределенных в пространстве волноводов, роль которых играют колонны. С точки зрения обычной радиотехники это — довольно странные волноводы, ибо

они заполнены и окружены веществом, поглощающим электромагнитное излучение, но все же это волноводы с присущими им особенностями.

Пусть толщина пленки равна  $L$ . Тогда интенсивность  $S$  волны, прошедшей через пленку в направлении, перпендикулярном плоскости рис. 7 (т. е. вдоль колонн), дается не одной экспоненциальной функцией,  $e^{-\alpha L}$ , как было бы в однородной среде, а бесконечным рядом

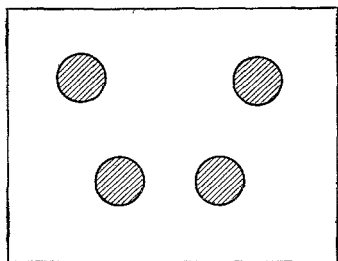


Рис. 7. Пленка а — Si : H как система хаотически распределенных волноводов.

$$S = \sum_{n \geq 1} c_n e^{-\alpha_n L}; \quad (13.1)$$

здесь  $c_n$  — коэффициенты, зависящие от граничных условий на освещенной поверхности, а величины  $\alpha_n$  выражаются через собственные значения граничной задачи о распространении волн в рассматриваемой системе волноводов (мы нумеруем числа  $\alpha_n$  в порядке возрастания). Существенно, что они зависят также от коэффициентов поглощения света либо в колонне ( $\alpha_k$ ), либо в ткани ( $\alpha_m$ ), вычисленных так, как если бы мы имели дело с соответствующей однородной средой:

$$\alpha_{k,m} = \frac{4\pi\sigma_{k,m}}{c\sqrt{\varepsilon_{k,m}}}, \quad (13.2)$$

где  $\sigma_k$  ( $\sigma_m$ ) и  $\varepsilon_k$  ( $\varepsilon_m$ ) — вещественные части электропроводности и диэлектрической проницаемости вещества колонны (среды) на частоте поглощаемого света. Если

$$\alpha_k L \gg 1, \quad \alpha_m L \gg 1, \quad (13.3)$$

то в ряде (13.1) остается лишь одно слагаемое,  $c_1 e^{-\alpha_1 L}$ , причем величина  $\alpha_1$  пропорциональна наименьшему из коэффициентов  $\alpha_k$  и  $\alpha_m$ . При этом мы формально возвращаемся к задаче об однородной среде; фактически, однако,  $\alpha_1$  может зависеть от радиусов колонн. Так, если все колонны одинаковы,  $\alpha_k \ll \alpha_m$  и среднее расстояние между колоннами велико по сравнению с  $\alpha_m^{-1}$ , то расчет дает <sup>200</sup>

$$\alpha_1 = \alpha_k \left[ 1 - 0,086 \left( \frac{\lambda}{R\sqrt{\varepsilon_k}} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (13.4)$$

где  $R$  — радиус колонны, а  $\lambda$  — длина световой волны в вакууме; предполагается, что выражение в скобках велико по сравнению с  $2\pi\sigma_k/\omega\varepsilon_k$  и  $0,086\lambda^2 R^{-2}\varepsilon_k^{-1} < 1$ .

Видим, что даже в этом сравнительно простом случае попытка интерпретировать результаты, полученные в опытах на пропускание, с помощью привычных формул электродинамики влечет за собой ошибку в определении частотной зависимости коэффициента поглощения света. Правда, в условиях, в которых наблюдается правило Урбаха, это может быть не очень существенно, так как тогда  $\alpha_k$  зависит от частоты экспоненциально, т. е. гораздо сильнее, чем второй сомножитель в формуле (13.4). Положение, однако, может стать очень серьезным, если хотя бы одно из неравенств (13.3) не выполняется. Тогда правая часть (13.1) не сводится к одному слагаемому и описание экспериментальных данных на привычном языке однородной среды может привести к совершенно ошибочным результатам. Так, положив, «по определению»,

$$S \sim \exp(-\alpha L),$$

мы пришли бы к «выводу» о зависимости коэффициента поглощения света от толщины пленки в отсутствие реальных для того причин.

Заметим в заключение, что, как отмечено в работе <sup>200</sup>, формула (13.1) по сути дела не связана непременно с рассмотренной выше моделью колонной структуры. Видимо, существенно лишь наличие внутренних границ раздела фаз — именно это обуславливает возникновение граничной задачи, допускающей, вообще говоря, не одно собственное значение.

Автор весьма признателен И. П. Звягину, А. Г. Миронову и Р. А. Сурису за критический просмотр рукописи и полезные замечания, а также Ш. Абе и Ю. Тоязаве, Ф. Вегнеру, А. А. Гоголину, Н. Ф. Мотту, М. Оливье и Ф. Буше, М. Пепперу, Дж. Л. Пишару и Дж. Сарма, М. Поллаку и Т. Танаке за любезную присылку препринтов.

# ПРИЛОЖЕНИЯ

## 1. ПОПРАВКИ К РЕЗУЛЬТАТАМ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ПРИ $T \rightarrow 0$

Зависимость статической электропроводности,  $\sigma$ , от размеров образца,  $L$ , может появиться и в рамках кинетического уравнения, если, например, рассеяние носителей заряда происходит на заряженной примеси и дебаевский радиус экранирования сравним с  $L$  (см. п. I, 5). Нас здесь, однако, будет интересовать зависимость  $\sigma$  от  $L$ , возникающая при учете поправок к кинетическому уравнению. Для дальнейшего достаточно рассмотреть случай слабого рассеяния ( $g \gg 1$ ) на хаотически расположенных точечных центрах, взаимодействующих с электронами путем короткодействующих сил <sup>50-52, 59, 60, 65</sup>. Обозначим концентрацию центров, концентрацию электронов и амплитуду упругого рассеяния электрона на отдельном центре соответственно через  $n_1$ ,  $n$  и  $v$ . Удобно воспользоваться графическим методом; при этом пунктирными линиями на диаграммах будут отвечать множители  $v$ , а сплошными линиям — усредненные одноэлектронные функции Грина, вычисленные с учетом упругого рассеяния; каждому кружку соответствует множитель  $n_1$ . Статическая электропроводность (при  $T = 0$ ) дается выражением

$$\sigma = \sum_{\mathbf{k}} k^2 \left[ \text{diagram with loop} \right] + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (k, k') \left[ \text{diagram with box } W(k, k') \right]. \quad (1.1)$$

Здесь через  $W(k, k')$  обозначена двухчастичная функция Грина:

$$W(k, k') \equiv \text{diagram with two vertical lines} = \text{diagram with one loop} + \text{diagram with two loops} + \text{diagram with three loops} + \dots \quad (1.2)$$

При этом, поскольку речь идет об упругом рассеянии, в условиях слабого взаимодействия,  $k^2 = k'^2$ . Как можно показать <sup>51, 56, 65</sup>, в высших порядках по  $n$  при  $d = 2$  существенным оказывается вклад в  $W(k, k')$  от графиков, в которых все пунктирные линии пересекаются. Этот вклад имеет вид

$$\tilde{W} = \text{diagram with two crossing loops} + \text{diagram with three crossing loops} + \dots \quad (1.3)$$

Вклад от графика с  $s$  пунктирными линиями ( $s \geq 2$ ) дается выражением

$$W^{(s)} = (nv^2)^s \left[ \frac{2\pi\rho(F)}{\sqrt{4\Gamma^2 + v_F^2(k+k')^2}} \right]^{s-1}; \quad (1.4)$$

здесь  $\rho(F)$  есть плотность состояний на уровне Ферми,  $v_F$  — фермиевская скорость,  $\Gamma$  — мнимая часть массового оператора, сопоставленного одноэлектронной (усреднен-

ной) функции Грина \*). В рамках принятой модели выражение для  $\Gamma$  хорошо известно:

$$\Gamma = \pi \rho(F) n v^2. \quad (I.5)$$

Сумма всех таких графиков (по  $s$ ) образует геометрическую прогрессию. Суммируя ее, получаем

$$\tilde{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{s \geq 2} \tilde{W}^s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = n v^2 J(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - n v^2 J(\mathbf{k}, \mathbf{k}')]^{-1}; \quad (I.6)$$

здесь

$$J(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi \rho(F)}{\sqrt{4\Gamma^2 + v_F^2 (\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2}}. \quad (I.7)$$

Очевидно, рассматриваемый вклад особенно велик при  $(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \rightarrow 0$ , т. е. при рассеянии назад. Действительно, полагая

$$4\Gamma^2 \gg v_F^2 (\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2, \quad (I.8)$$

мы получаем

$$\tilde{W} = n v^2 \left[ -1 + \frac{\Gamma \left( 1 + \frac{1}{2} l^2 (\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2 \right)}{\pi \rho(F) n v^2} \right]^{-1}, \quad (I.6')$$

где  $l = (1/2) v_F \Gamma^{-1}$  — длина свободного пробега по импульсу. В силу (I.5) это дает

$$\tilde{W} = \frac{2n v^2}{l^2 (\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2} \quad (I.9)$$

Соответственно, второе слагаемое в правой части (I.4) пропорционально

$$\int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \frac{(\mathbf{k}, \mathbf{k}')^2}{l^2 (\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2} \approx - \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k} \frac{\mathbf{k}^2}{l^2 (\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2}. \quad (I.10)$$

Удобно произвести замену переменных, полагая  $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{p}$ . Тогда в правой части (I.10) появляется интеграл

$$J = - \int \frac{d\mathbf{p}}{p^2} \quad (I.11a)$$

Верхний предел здесь несуществен для наших целей: он определяет конечный (и не зависящий от  $L$ ) вклад в  $\sigma$  и  $g$ , связанный с нарушением приближенного равенства  $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$ . Нижний предел при  $T \rightarrow 0$  определяется из того условия, что — с точностью до множителя  $2\pi$  — волновое число не должно быть меньше обратной длины образца \*\*). Таким образом, мы получаем (выписывая только значение интеграла на нижнем пределе и обозначая через  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $c_3$  и  $\sigma_B$  положительные постоянные и значение проводимости, получающееся из кинетического уравнения Больцмана):

а)  $d = 1$ :

$$J = -L, \quad g = L^{-1} \sigma_B - c_1 \quad (I.12a)$$

и, следовательно,

$$\beta = -1 - \frac{c_1}{ig}, \quad \frac{d\beta}{dg} = \frac{c_1}{g^2} \quad (I.13a)$$

б)  $d = 2$ :

$$J = -\ln L, \quad g = \sigma_B - c_2 \ln L \quad (I.12b)$$

\*) Вещественная часть массового оператора отброшена за малостью. Справедливость этого пренебрежения не всегда очевидна, но на появление рассматриваемой ниже сингулярности оно не влияет.

\*\*) При  $T \neq 0$  на минимальное значение волнового числа накладывается еще одно ограничение снизу. В самом деле, здесь становится возможным неупругое рассеяние; следовательно, принятая выше трактовка справедлива лишь, пока длина образца меньше характерного расстояния,  $L_{\text{эфф}}$ , на которое электрон может продифундировать в поле примеси, не испытывая неупругого рассеяния. При  $L > L_{\text{эфф}}$  нижний предел интеграла (I.11) следует заменить на  $L_{\text{эфф}}^{-1}$ . Согласно <sup>203</sup>  $L_{\text{эфф}} = \sqrt{U_1/2}$ , где  $l_1$  — длина свободного пробега относительно неупругого рассеяния.

и, следовательно,

$$\beta = -\frac{c_2}{g}, \quad \frac{d\beta}{dg} = \frac{c_2}{g^2}. \quad (I.13б)$$

б)  $d = 3$ :

$$r = L^{-1}, \quad g = L\sigma_B + c_3 \quad (I.12в)$$

и, следовательно,

$$\beta = 1 - \frac{c_3}{g}, \quad \frac{d\beta}{dg} = \frac{c_3}{g^2}. \quad (I.13в)$$

Видим, что в трехмерном случае зависимость  $\sigma$  от  $L$  совершенно несущественна; в пределе при  $L \rightarrow \infty$  она исчезает. С другой стороны, при  $d = 2$  она важна. Еще важнее оказалась бы эта зависимость в одномерной системе. Там, однако, заранее ясно<sup>35,36</sup>, что при  $T \rightarrow 0$  случай  $g \gg 1$  не реализуется и весь подход, использованный в этом приложении, неприменим. Появление в формуле (1.12б) логарифма размерной величины не должно вызывать смущения: мы интересовались лишь особенностью функции  $g$  при  $L \rightarrow \infty$ , не обращая внимания на верхний предел интегрирования. При точном расчете выясняется, что  $c_2 = \pi^{-2}$ , а  $\ln L$  в (1.12б) заменяется на  $\ln L/l_p$ , где  $l_p$  — длина свободного пробега по импульсу (ее здесь можно вычислять с учетом лишь первого слагаемого в (1.1)).

## II. О РОЛИ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Расчет термодинамических характеристик системы многих частиц при низких температурах значительно облегчается, если воспользоваться тождествами, вытекающими, при определенных условиях, из факта эквивалентности двух определений числа частиц  $N$ <sup>128</sup>. С одной стороны, последнее дается термодинамическим соотношением<sup>129</sup>

$$N = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial F} \right)_T; \quad (II.1)$$

здесь  $\Omega$  — термодинамический потенциал в большом ансамбле Гиббса,  $T$  — температура в энергетических единицах,  $F$  — химический потенциал (уровень Ферми). С другой стороны,

$$N = V \int \rho(E) n_F(E) dE, \quad (II.2)$$

где  $n_F(E) = [\exp \beta(E - F) + 1]^{-1}$ ,  $\beta = T^{-1}$ ,  $\rho(E)$  — плотность состояний, определяемая равенством

$$\rho(E) = \frac{2}{V} \text{Sp Im } G_T(E). \quad (II.3)$$

Через  $V$  и  $G_T$  здесь обозначены соответственно объем системы и запаздывающая одно-частичная функция Грина.

Интеграл по энергетической переменной  $E$  в правой части (II.2) берется по всей области энергий, в которой  $\rho(E) \neq 0$ . Формула (II.2) — точная; она справедлива в применении к любой системе взаимодействующих частиц. Эффекты взаимодействия описываются массовым оператором,  $M_T$ , входящим в выражение для функции Грина. Именно, в произвольном представлении, задаваемом квантовыми числами  $\lambda$ , мы имеем<sup>130</sup>

$$G_T^{-1}(\lambda, \lambda'; E) = 2\pi (\lambda | E - \mathcal{H}_0 - M_T | \lambda'), \quad (II.4)$$

где  $\mathcal{H}_0$  — аддитивная часть полного гамильтониана системы  $\mathcal{H}^*$ ). Естественно, массовый оператор зависит, вообще говоря, от любых интенсивных переменных, характеризующих данную систему частиц, в том числе от концентрации частиц и от температуры.

Обозначим через  $\mathcal{H}'$  гамильтониан системы, в который включено слагаемое  $-FN$ :

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} - FN. \quad (II.5)$$

Из условия нормировки полной матрицы плотности мы получаем

$$\Omega = -T \ln \text{Sp} \exp(-\beta \mathcal{H}'). \quad (II.6)$$

\*) В отличие от<sup>130</sup>, где переменная  $E$  отсчитывалась от уровня Ферми, мы не специализируем здесь начало отсчета энергии.

Продифференцируем это равенство по  $T$  при  $F = \text{const}$  и, затем, по  $F$  при  $T = \text{const}$  и воспользуемся термодинамическими соотношениями (II.1) и

$$S = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_F, \quad \left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)_F = \left( \frac{\partial S}{\partial F} \right)_T, \quad (\text{II.7})$$

где  $S$  — энтропия. Получим следующие тождества:

$$T \left( \frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_F = \Omega - \langle \mathcal{H}' \rangle - FT \left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)_F \quad (\text{II.8})$$

и

$$\left( \frac{\partial \langle \mathcal{H}' \rangle}{\partial F} \right)_T + N = -TF \left( \frac{\partial^2 S}{\partial F^2} \right)_T \quad (\text{II.9})$$

или, эквивалентно,

$$\left( \frac{\partial \langle \mathcal{H}' \rangle}{\partial F} \right)_T - F \left( \frac{\partial N}{\partial F} \right)_T = -TF \left( \frac{\partial^2 S}{\partial F^2} \right)_T. \quad (\text{II.9}')$$

Угловые скобки здесь и в дальнейшем обозначают усреднение как по большому ансамблю Гиббса, так и по случайному полю, если таковое имеется.

Заметим, что при  $T \rightarrow 0$  правые части равенств (II.9), (II.9') обращаются в нуль быстрее, чем линейно \*).

Выражение для  $\langle \mathcal{H}' \rangle$  в системе частиц с бинарным взаимодействием можно записать в виде <sup>130</sup>

$$\langle \mathcal{H}' \rangle = \frac{i}{2} \lim_{t \rightarrow -0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \sum_{\lambda'} \times \\ \times \left\{ EG_c(\lambda', \lambda'; \omega) + \sum_{\lambda} (\lambda' | \mathcal{H}_0 - F | \lambda) G_c(\lambda, \lambda'; \omega) \right\}, \quad (\text{II.10})$$

где  $G_c$  — причинная функция Грина,  $\omega = E - F$ , а интегрирование по  $\omega$  распространяется на всю область, где отлична от нуля подынтегральная функция. Кажущееся отсутствие здесь второй функции Грина не должно вызывать удивления: она исключена с помощью уравнений движения для  $G_c$ ; фактически эта функция определяет массовый оператор, фигурирующий в формуле (II.4).

Удобно выбрать в качестве базисной систему собственных функций оператора  $\mathcal{H}_0$ ; собственные значения его обозначим через  $W_\lambda$ . Тогда, выражая функцию  $G_c$  через  $G_T$ , можем привести равенство (II.10) к более удобному виду <sup>138</sup>:

$$\langle \mathcal{H}' \rangle = \langle \mathcal{H} \rangle - NF = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \text{Im} G_T(\lambda, \lambda; E) n_F(E) (E + W_\lambda) - NF. \quad (\text{II.11})$$

Это выражение и надо подставить в тождества (II.8) — (II.9'). Имея в виду воспользоваться ими для исследования температурной зависимости числа частиц и плотности состояний, заметим, что химический потенциал и температура входят в формулу (II.11) как явно — через функцию Ферми, так и неявно — через массовый оператор \*\*). Следовательно,

$$\left( \frac{\partial \langle \mathcal{H}' \rangle}{\partial F} \right)_T = \left( \frac{\partial \langle \mathcal{H}' \rangle}{\partial F} \right)_{T, M_T} + \frac{\delta \langle \mathcal{H}' \rangle}{\delta M_T} \left( \frac{\partial M_T}{\partial F} \right)_T. \quad (\text{II.12})$$

\*) Здесь мы пользуемся теоремой Нернста. При рассмотрении неупорядоченных материалов это требует разъяснения, ибо конфигурация атомов в стекле и в аморфном материале метастабильна, а не полностью равновесна. Нас здесь, однако, интересуют лишь электронные процессы. Поскольку времена релаксации атомной структуры велики по сравнению с характерными электронными временами, мы вправе рассматривать состояния электронной подсистемы в заданном внешнем поле, определяемом той или иной конфигурацией атомов.

\*\*) В принципе от температуры могли бы зависеть и сами одночастичные уровни  $W_\lambda$ . Связанная с этим поправка, естественно, должна приниматься во внимание при вычислении  $N$ .

Второе слагаемое в правой части (II.12) представляет собой сокращенную запись довольно громоздкого выражения

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \sum_{\lambda, \lambda'} \frac{\delta \langle \mathcal{E}' \rangle}{\delta M_r(\lambda, \lambda'; E)} \left( \frac{\partial M_r(\lambda, \lambda'; E)}{\partial F} \right)_T.$$

Согласно (II.9) при  $T \rightarrow 0$  первое слагаемое в правой части (II.12) есть  $-N$  и, следовательно, тождество (II.9) можно переписать в виде

$$\frac{\delta \langle \mathcal{E}' \rangle}{\delta M_r} \left( \frac{\partial M_r}{\partial F} \right)_T = -TF \left( \frac{\partial^2 S}{\partial F^2} \right)_T. \quad (\text{II.13})$$

Поскольку, вообще говоря,  $\left( \frac{\partial M_r}{\partial F} \right)_T \neq 0$ , отсюда следует, что

$$\frac{\delta \langle \mathcal{E}' \rangle}{\delta M_r} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0. \quad (\text{II.14})$$

В силу (II.7) и (II.8) отсюда следует, что

$$\frac{\delta \Omega}{\delta M_r} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0, \quad \left( \frac{\delta N}{\delta M_r} \right)_F \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0. \quad (\text{II.15})$$

Это означает, что при  $T \rightarrow 0$ , вычисляя  $N$  по формуле (II.2), мы должны принимать во внимание только явную зависимость от  $F$ , содержащуюся в функции Ферми.

Обратимся теперь к поправкам, возникающим в функции  $N(F, T)$  при малой, но конечной температуре в результате взаимодействия между частицами. Положим

$$M_r = M_0 + \Delta M, \quad \langle \mathcal{E} \rangle = \langle \mathcal{E} \rangle_0 + \Delta \langle \mathcal{E} \rangle, \quad N = N_0 + \Delta N, \quad (\text{II.16})$$

понимая под  $M_0$ ,  $N_0$  и  $\langle \mathcal{E} \rangle_0$  соответствующие величины при  $T = 0$ , а под  $\Delta M$ ,  $\Delta N$  и  $\Delta \langle \mathcal{E} \rangle$  — температурные поправки. В дальнейшем мы будем считать, что  $\Delta M \ll M_0$  (для краткости мы не ставим здесь и в дальнейшем знака абсолютного значения, имея, однако, его в виду там, где это необходимо). Заметим, однако, что это предположение может и не выполняться. Действительно, пользуясь формулой для конечных приращений, можем написать

$$\Delta M = \left( \frac{\partial M_r}{\partial T} \right)_{T=T^*} T,$$

где  $0 \leq T^* \leq T$ . Это выражение действительно мало по сравнению с  $M_0$ , если массовый оператор не имеет полюсов («нормальная» система) или если положения этих полюсов не зависят заметным образом от температуры. Если, однако, такая зависимость имеется, то «поправка»  $\Delta M$  может оказаться сколь угодно большой по сравнению с  $M_0$ . При этом представление массового оператора в виде (II.16) теряет смысл, а следующие ниже выводы оказываются, вообще говоря, неоправданными. Вопрос о том, когда возникает такая ситуация, мы обсудим в конце этого приложения, а пока ограничимся случаем  $\Delta M \ll M_0$ . Тогда температурная поправка к числу частиц, связанная с  $\Delta M$ , есть

$$\Delta N = \left( \frac{\delta N}{\delta M_r} \right)_{F, T=0} \Delta M + O((\Delta M)^2). \quad (\text{II.17})$$

Согласно формуле (II.15) первое слагаемое здесь равно нулю. Для оценки второго слагаемого заметим, что, согласно теореме Нернста, производная от  $\langle \mathcal{E} \rangle$  по температуре должна обращаться в нуль при  $T \rightarrow 0$ . В самом деле, в переменных  $T, F$  мы имеем <sup>129</sup>

$$d(\langle \mathcal{E} \rangle - TS - FN) = -S dT - N dF,$$

т. е.

$$\left( \frac{\partial \langle \mathcal{E} \rangle}{\partial T} \right)_F = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_F + F \left( \frac{\partial S}{\partial F} \right)_T \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0. \quad (\text{II.18})$$

При  $T \rightarrow 0$  правая часть (II.18) обращается в нуль не слабее, чем линейно. Пользуясь теперь выражением (II.14) и соотношением

$$\left( \frac{\partial n_F}{\partial T} \right)_{T \rightarrow 0} \rightarrow -\pi^2 T \delta'(E - F),$$

легко убедиться, что при  $T \rightarrow 0$  производная  $(\partial M_T / \partial T)_F$  также убывает не слабее, чем линейно. Следовательно,

$$\Delta M = O(T^2), \quad \Delta N = O(T^4). \quad (\text{II.19})$$

Заметим, что это — оценка «по минимуму»: в различных частных случаях  $\Delta M$  убывает с температурой еще сильнее. Для наших целей, однако, оценка (II.19) достаточна.

Итак, рассматривая низкотемпературную термодинамику вырожденной системы ферми-частиц, мы вправе с точностью до величин порядка  $T^4$  игнорировать возможную температурную зависимость плотности состояний — если «одноэлектронные» уровни,  $W_\lambda$ , сами не зависят от температуры и полюсы массового оператора не сдвигаются с температурой заметным образом.

Для иллюстрации того, в каких условиях может возникнуть такая зависимость, удобно рассмотреть простой модельный пример — задачу с простейшим гамильтонианом типа Хаббарда, описывающим короткодействующие силы притяжения или отталкивания. Пусть мы имеем систему электронов, движущихся в некоторой, не обязательно упорядоченной, атомной матрице. Перенумеруем узлы этой матрицы индексом  $g$  и обозначим через  $\sigma$  спиновое квантовое число электрона. Выберем в качестве базисной систему ортогонализированных волновых функций, описывающих электроны, локализованные у различных узлов (в идеальном кристалле это были бы функции Ванье). Соответствующие одноэлектронные энергии обозначим через  $W$ ; они могут зависеть как от номера узла, так и от  $\sigma$ ; одному и тому же значению  $g$  могут, вообще говоря, соответствовать различные энергии  $W$ , отвечающие основному и возбужденным одноэлектронным состояниям. Тогда роль  $\lambda$  играет совокупность чисел  $\{g, W, \sigma\}$ ,

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\lambda} W_{\lambda} a_{\lambda}^* a_{\lambda},$$

а интересующий нас гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2 \\ \lambda'_1, \lambda'_2}} (\lambda_1, \lambda_2 | V | \lambda'_1, \lambda'_2) a_{\lambda_1}^* a_{\lambda_2}^* a_{\lambda'_2} a_{\lambda'_1}, \quad (\text{II.20})$$

причем символ  $\sum_{\lambda}$  может обозначать как сумму, так и интеграл, а

$$(\lambda_1, \lambda_2 | V | \lambda'_1, \lambda'_2) = \frac{1}{2} V_0 \delta_{g_1 g_2} \delta_{g_1 g'_1} \delta_{g_2 g'_2} (\delta_{\sigma_1 \sigma'_1} \delta_{\sigma_2 \sigma'_2} - \delta_{\sigma_1 \sigma'_2} \delta_{\sigma_2 \sigma'_1}) \delta_{\sigma_2, -\sigma_1}; \quad (\text{II.21})$$

здесь  $\delta_{g_1 g_2}$  и т. д. — символы Кронекера, а  $V_0$  — положительная или отрицательная постоянная.

Составим обычным путем уравнения движения для функций Грина \*)

$$G(\lambda, \lambda'; E) = \langle \langle a_{\lambda} | a_{\lambda'}^* \rangle \rangle_E, \quad G_2(\alpha, \alpha'; \lambda, \lambda'; E) = \langle \langle a_{\alpha}^* a_{\alpha'} a_{\lambda} | a_{\lambda'}^* \rangle \rangle_E,$$

где  $\alpha = \{g, W, -\sigma\}$ . Получим

$$(E - W) G(\lambda, \lambda'; E) = -\frac{1}{2\pi} + V_0 G_2(\alpha, \alpha'; \lambda, \lambda'; E), \quad (\text{II.22})$$

$$(E - W - V_0) G_2(\alpha, \alpha'; \lambda, \lambda'; E) = -\frac{n_{\alpha}}{2\pi}. \quad (\text{II.23})$$

где

$$n_{\alpha} = \langle a_{\alpha}^* a_{\alpha} \rangle. \quad (\text{II.24})$$

Заметим, что третья функция Грина в уравнении (II.23) не появляется, т. е. вместо бесконечной цепочки уравнений мы получаем простую конечную систему. Это связано с выбором весьма радикальной аппроксимации (II.21).

Пусть для простоты одноэлектронные энергии  $W_{\lambda}$  не зависят от ориентации спина. Тогда

$$n_{\alpha} = n_{\alpha} = n(W). \quad (\text{II.25})$$

Решая систему уравнений (II.22) и (II.23) и принимая во внимание равенство

$$n(W) = 2 \int dE \operatorname{Im} G_T(\lambda, \lambda'; E) \mathbf{r}_F(E), \quad (\text{II.26})$$

\*) Обозначения и нормировка функций Грина — такие же, как в книге<sup>130</sup>.



мы получаем

$$G(\lambda, \lambda; E) = -\frac{1}{2\pi} \frac{E - W - (1-n)V_0}{(E - W - V_0)(E - W)}, \quad (\text{II.27})$$

$$G_2(\alpha, \alpha; \lambda, \lambda; E) = -\frac{n}{2\pi} \cdot \frac{1}{E - W - V_0}, \quad (\text{II.28})$$

$$n(W) = \frac{n_F(W)}{1 + n_F(W) - n_F(W + V_0)}. \quad (\text{II.29})$$

Обозначим через  $\rho_0(W)$  плотность одноэлектронных состояний с энергией  $W$ . Пользуясь формулами (II.3) и (II.27), находим плотность состояний рассматриваемой системы многих частиц:

$$\rho(E) = \rho_0(E) [1 - n(E)] + \rho_0(E - V_0) n(E - V_0). \quad (\text{II.30})$$

Правая часть (II.30) зависит от температуры. Простое исследование, однако, показывает, что если гамильтониан (II.20) описывает силы притяжения, то при достаточно низких температурах это влияет только на величину правой части (II.2), но не на температурную ее зависимость. С другой стороны, в случае сил отталкивания положение может измениться. Это обстоятельство имеет совершенно ясное происхождение. В самом деле, при  $T \ll |V_0|$  силы отталкивания исключают возможность попадания двух электронов на один и тот же узел. Это — та же ситуация, которая имеет место в задаче о распределении электронов по атомам примеси в полупроводниках. Как известно<sup>24</sup>, при этом в случае «простых» центров, обладающих лишь одним уровнем каждый и способных захватить лишь один электрон, среднее число заполнения примесного уровня,  $f_t$ , имеет вид

$$f_t = \left[ \frac{g_0}{g_1} \exp\left(\frac{E_t - F}{T}\right) + 1 \right]^{-1}; \quad (\text{II.31})$$

здесь  $g_0$  и  $g_1$  — статистические веса состояний пустого центра и центра, занятого электроном,  $E_t$  — энергия электрона на примесном уровне. Очевидно, выражение (II.31) можно переписать в виде функции Ферми, если ввести «эффективную энергию»  $E_t^* = E_t + T \ln g_0/g_1$ ; соответствующая плотность состояний есть

$$\rho(E) = N_t \delta(E - E_t^*),$$

где  $N_t$  — концентрация центров.

Видим, что это, в сущности, тот самый случай температурной зависимости энергетических уровней, о котором говорилось выше (см. сноску на с. 628)\*).

Аналогичные результаты оказываются справедливыми и в задаче с аномальными спариваниями, существенными, например, в задаче о кулоновской щели<sup>113</sup>. В цитированной работе использовалось представление об эффективном притяжении между электронами и дырками ( $V_0 > 0$ ). При этом в аппроксимации (II.24) основные уравнения работы<sup>113</sup> принимают вид

$$\begin{aligned} (E - W) G(\mathbf{R}, \mathbf{R}; E) - V_0 n' G'(\mathbf{R}, \mathbf{R}; E) &= -1/2\pi, \\ (E + W) G'(\mathbf{R}, \mathbf{R}; E) - V_0 n' G(\mathbf{R}, \mathbf{R}; E) &= 0, \end{aligned} \quad (\text{II.32})$$

где

$$n'(W) = \langle a_\lambda a_\alpha \rangle = \langle a_\alpha^* a_\lambda^* \rangle, \quad G'(\mathbf{R}, \mathbf{R}; E) = \langle a_\alpha^* | a_\lambda^* \rangle. \quad (\text{II.33})$$

Эта система уравнений (с точностью до обозначений) хорошо известна в теории сверхпроводимости. Очевидно,

$$\text{Im } G(E) = \frac{E + W}{4(W^2 + n'^2 V_0^2)^{1/2}} [\delta(E - \sqrt{W^2 + n'^2 V_0^2}) - \delta(E + \sqrt{W^2 + n'^2 V_0^2})], \quad (\text{II.34})$$

а для определения  $n'$  получается стандартное уравнение

$$n' = \frac{V_0 n'}{2(W^2 + n'^2 V_0^2)^{1/2}} \text{th} \left( \frac{\beta \sqrt{W^2 + n'^2 V_0^2}}{2} \right). \quad (\text{II.35})$$

Как легко убедиться, при  $\beta V_0 \ll 1$  нетривиальное решение для  $n'$  отсутствует; с другой стороны, при низких температурах, когда  $\beta V_0 \gg 1$ , мы получаем

$$n' = \frac{1}{2} (1 + 4\eta - 4W^2 V_0^2)^{1/2}, \quad (\text{II.36})$$

\*) Я признателен И. П. Звягину, обратившему мое внимание на это обстоятельство.

где

$$\eta = -2 \exp \left( -\frac{V_0}{2T} \right). \quad (\text{II.37})$$

Решение (II.36) существует, пока

$$\frac{W}{V_0} < \frac{1+2\eta}{2}. \quad (\text{II.38})$$

Видно, что, как и следовало ожидать, температурная зависимость  $n'$  оказывается несущественной, коль скоро  $\beta V_0 \gg 1$ . Для массового оператора, определяемого по-прежнему равенством (II.4), мы получаем теперь

$$M = \frac{V_0^3 (1+4\eta) - W^2}{E+W}. \quad (\text{II.39})$$

Видим, что полюс его,  $E = -W$ , вообще не зависит от температуры.

До сих пор мы считали величину  $V_0$  заданной. При усреднении по конфигурациям случайного поля происходит перебор всех значений  $V_0$ . Однако в рассматриваемых условиях кулоновская щель возникает только за счет тех конфигураций, в которых  $V_0 > 0$  и  $\beta V_0 > 1$ .

Московский государственный университет  
им. М. В. Ломоносова.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Коломиец Б. Т., Горюнова Н. А.—ЖТФ, 1955, т. 25, с. 2069.
2. Kolomiets B. T.—Phys. Stat. Sol., 1964, v. 7, p. 359.
3. Садовский М. В.—УФН, 1981, т. 133, с. 223.
4. Петраковский Г. А.—УФН, 1981, т. 134, с. 305.
5. Mott N. F.—J. Phys. Ser. C, 1980, v. 13, p. 5433.
6. Abram R. A., Rees G. J., Wilson B. L. H.—Adv. Phys., 1978, v. 7, p. 799.
7. Brodsky M. H., Cardona M.—J. Non-Cryst. Sol., 1978, v. 31, p. 81.
8. Connell G. A. N., Lucovsky G.—Ibid., p. 123.
9. Moustakas T. D.—J. Electron. Res., 1979, v. 8, p. 391.
10. Fritzsche M., Tsai C. C., Persans P.—Sol. State Techn. Jan. 1978, p. 55.
11. Yoshihiro Hamakawa—Surf. Sci., 1979, v. 86, p. 444.
12. Le Comber P. G.—Sci. Progr. Oxf., 1979, v. 66, p. 105.
13. Böttger H., Keiper R., Schuchardt R.—Wissenschaft und Fortschritt, 1980, Bd. 30, S. 209.
14. Peercy P. S.—Nucl. Instr. and Meth., 1981, v. 182—183, p. 337.
15. Fundamental Physics of Amorphous Semiconductors: Proc. of the Kyoto Summer Institute. Kyoto, Japan, September 8—11, 1980/Ed. by F. Yonezawa. Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1981.—(Эта книга содержит тексты лекций Г. Фриче, Д. Адлера, И. Соломона, У. Э. Спира, П. Дж. Ле Комбера, М. Х. Бродского, В. Пола, Дж. Луковского, К. Танаки, Ф. Йонезава и М. Х. Козна, В. Л. Бонч-Бруевича, Д. Уира, посвященных различным аспектам физики аморфных и стеклообразных материалов.)
16. Лифшиц И. М., Пастур Л. А., Гредескул С. А.—ФНТ, 1976, т. 2, с. 1093.
17. Гредескул С. А., Пастур Л. А.—ФНТ, 1975, т. 1, с. 277.
18. Mott N. F.—Contemp. Phys., 1977, v. 18, p. 225.
19. Kolomiets B. T., Lyubin V. M.—Mat. Res. Bull., 1978, v. 13, p. 1343.
20. Любин В. М.—В кн.: Успехи научной фотографии.—М.: Наука, 1980.—С. 66.
21. Коломиец Б. Т.—In: Amorphous Semiconductors-78. Pardubice, September 1978.—Prague: Institute of Solid State Physics. Czechoslovak Academy of Science; Pardubice: University of Chemical Technology, 1978.—P. 3.
22. Böttger H.—Ibid., P. 13.
23. Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Кайпер Р., Мионов А. Г., Эндерлайн Р., Эссер Б. Электронная теория неупорядоченных полупроводников.—М.: Наука, 1981.
24. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников.—М.: Наука, 1977.
25. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах/Пер. с англ. под ред. Б. Т. Коломийца.—М.: Мир, 1974.
26. Anderson P. W.—Phys. Rev., 1958, v. 102, p. 1492.

27. Мотт Н. Ф.— *Phil. Mag.*, 1969, v. 65, p. 1259.
28. Березинский В. Л., Горьков Л. П.— *ЖЭТФ*, 1979, т. 77, с. 2498.
29. Edwards J. T., Thouless D. J.— *J. Phys. Ser. C*, 1972, v. 5, p. 807.
30. Weaire D., Kramer B.— *J. Non-Cryst. Sol.*, 1980, v. 35—36, p. 9.
31. Dean P.— *Proc. Phys. Soc.*, 1959, v. 73, p. 413; *Proc. Roy Soc. Ser. A*, 1960, v. 254, p. 507.
32. Yonezawa F.— *J. Non-Cryst. Sol.*, 1980, v. 35—36, p. 29.
33. Mott N. F., Twose W. D.— *Adv. Phys.*, 1961, v. 10, p. 107; перевод: УФН, 1963, т. 79, с. 691.
34. Borland R. E.— *Proc. Roy. Soc. Ser. A*, 1963, v. 274, p. 926.
35. Borland R. E., Bird N. E.— *Proc. Phys. Soc.*, 1964, v. 83, p. 23.
36. Березинский В. Л.— *ЖЭТФ*, 1973, т. 65, с. 125.
37. Гольдшейдт Н. Я., Молчанов С. А., Пастур Л. А.— *Функц. анализ и его прил.*, 1977, т. 11, с. 1.
38. Мотт Н. Ф. Переходы металлов — изоляторов/Пер. с англ. под ред. С. В. Вонсовского.— М.: Наука, 1979.
39. Бонч-Бруевич В. Л., Гласко В. Б.— *ФТТ*, 1961, т. 3, с. 36.
40. Бонч-Бруевич В. Л.— *Ibid.*, с. 47.
41. Гоголин А. А., Мельников В. И., Рашба Э. И.— *ЖЭТФ*, 1975, т. 69, с. 307.
42. Gogolin A. A., Mel'nikov V. I.— *Phys. Stat. Sol. Ser. b*, 1978, v. 88, p. 377.
43. Гоголин А. А., Мельников В. И., Рашба Э. И.— *ЖЭТФ*, 1977, т. 72, с. 629.
44. Гоголин А. А.— *ЖЭТФ*, 1976, т. 71, с. 1912.
45. Gogolin A. A. Preprint in Theoretical Physics *HU-TFT*.— Research Institute for Theoretical Physics, University of Helsinki, 1981.— P. 1.
46. Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и  $\epsilon$ -разложение/Пер. с англ. под ред. В. И. Федянина.— М.: Мир, 1975.
47. Балееску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика/Пер. с англ. под ред. Д. Н. Зубарева, Ю. Л. Климонтовича.— М.: Мир, 1978.— Т. 1, гл. 10.
48. Wegner F.— *Zs. Phys. Ser. B*, 1976, Bd. 25, S. 327.
49. Wegner F.— *Ibid.*, 1979, Bd. 35, S. 207.
50. Орперман Р., Wegner F.— *Ibid.*, Bd. 34, S. 327.
51. Садовский М. В.— *ЖЭТФ*, 1976, т. 70, с. 1936.
52. Abrahams E., Anderson P. W., Licciardello D. C., Ramakrishnan T. V.— *Phys. Rev. Lett.*, 1979, v. 42, p. 673.
53. Abrahams E., Ramakrishnan T. V.— *J. Non-Cryst. Sol.*, 1980, v. 35—36, p. 15.
54. Ефетов К. Б., Ларкин А. И., Хмельницкий Д. Е.— *ЖЭТФ*, 1980, т. 79, с. 1120.
55. Anderson P. W., Thouless D. J., Abrahams E., Fisher D. S.— *Phys. Rev. Ser. B*, 1980, v. 22, p. 3519.
56. Anderson P. W.— *Ibid.*, 1981, v. 23, p. 4829.
57. Бонч-Бруевич В. Л., Миронов А. Г.— *J. de Phys.* 1981, v. 42, Suppl. C-4, p. 33.
58. Горьков Л. П., Ларкин А. И., Хмельницкий Д. Е.— *Письма ЖЭТФ*, 1979, т. 30, с. 248.
59. Хмельницкий Д. Е.— *Ibid.*, 1980, т. 32, с. 298.
60. Mott N. F., Kaveh M. Preprint.— 1981.
61. Langer J. S., Neal T.— *Phys. Rev. Lett.*, 1966, v. 16, p. 984.
62. Neal T.— *Phys. Rev.*, 1968, v. 169, p. 508.
63. Thouless D. J.— *Phys. Rev. Lett.*, 1977, v. 39, p. 1168.
64. Dolan D. J., Osheroff D. D.— *Ibid.*, 1979, v. 43, p. 721.
65. Bishop D. J., Tsui D. C., Dynes R. C.— *Ibid.*, 1980, v. 44, p. 1153.
66. Kaveh M., Mott N. F.— *J. Phys. Ser. C*, 1981, v. 14, p. L177.
67. Lee P. A.— *Phys. Rev. Lett.*, 1979, v. 42, p. 21; *J. Non-Cryst. Sol.*, 1980, v. 35—36, p. 21.
68. Hodges C. H.— *J. de Phys.*, 1981, t. 42, Suppl. C-4, p. 67.
69. Polya G.— *Math. Ann.*, 1921, Bd. 84, S. 149.
70. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения (дискретные распределения)/Пер. с англ. под ред. Е. Б. Дынкина с предисловием акад. А. Н. Колмогорова.— М.: ИЛ, 1962.
71. Бонч-Бруевич В. Л.— *Письма ЖЭТФ*, 1980, т. 32, с. 222.
72. Mott N. F.— *Comm. Phys.* 1976, v. 1, p. 203.
73. Mott N. F.— *Phil. Mag.*, 1981, v. 44, p. 265.
74. Freed K. F.— *Phys. Rev. Ser. B*, 1972, v. 5, p. 4802.
75. Edwards S. F.— *J. Non-Cryst. Sol.*, 1979, v. 32, p. 113.

74. Mott N. F., Pepper M., Pollitt S., Wallis R. H., Adkins C.—*Proc. Roy. Soc. Ser. A*, 1975, v. 315, p. 169.
75. Kaveh M., Mott N. F.—*J. Phys. Ser. C*, 1981, v. 14, p. L177.
76. Von Neumann E. J., Wigner E. P.—*Phys. Zs.*, 1929, Bd. 30, S. 465.
77. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике.— 2-е изд.— М.: Наука, 1971.— Приложение А.
78. Ньютон Г. Теория рассеяния волн и частиц.— М.: Мир, 1971.
79. Last B. J., Thouless D.—*J. Phys. Ser. C*, 1974, v. 7, p. 699.
80. Бонч-Бруевич В. Л.— В кн.: Труды шестой Международной конференции по аморфным и жидким полупроводникам. Электронные явления в некристаллических полупроводниках.— Л.: Наука, 1976.— С. 76; ДАН СССР, 1976, т. 226, с. 298.
81. Бонч-Бруевич В. Л. Препринт физического факультета МГУ № 3, Москва, 1982; *Phys. Stat. Sol. Ser. b*, 1982, v. 113, p. 493.
82. Бонч-Бруевич В. Л.— ФТП, 1968, т. 2, с. 363.
83. Bonch-Bruевич V. L.— In: *Theory of Condensed Matter: Lectures presented at an Intern. Course, Trieste, 3 October — 16 December 1967.*— Vienna: Intern. Atomic Agency, 1968.— P. 989.
84. Anderson P. W.—*Phys. Rev. Lett.*, 1975, v. 109, p. 1492.
85. Mott N. F., Davis E. A., Street R. A.—*Phil. Mag.*, 1975, v. 3, p. 961.
86. Street R. A., Mott N. F.—*Phys. Rev. Lett.*, 1975, v. 35, p. 1293.
87. Street R. A.— Цит. в <sup>80</sup> сб.— С. 232.
88. Альтшулер Б. Л., Аронов А. Г.— Письма ЖЭТФ, 1978, т. 27, с. 100.
89. Altshuler B. L., Aronov A. G.—*Sol. State Comm.*, 1979, v. 30, p. 115.
90. Альтшулер Б. Л., Аронов А. Г.— ЖЭТФ, 1979, т. 77, с. 2028.
91. Altshuler B. L., Aronov A. G., Lee P. A.—*Phys. Rev. Lett.*, 1980, v. 44, p. 1288.
92. Kaveh M., Mott N. F.—*J. Phys. Ser. C*, 1981, v. 14, p. L 183.
93. Altshuler B. L., Khmel'nitzkii D., Larkin A. I., Lee P. A.—*Phys. Rev. Ser. B*, 1980, v. 22, p. 5142.
94. Hikami S., Larkin A. I., Nagaoka Y.—*Progr. Theor. Phys.*, 1980, v. 63, p. 707.
95. Kaveh M., Uren M. J., Davies R. A., Pepper M.—*J. Phys. Ser. C*, 1981, v. 14, p. 413.
96. Kawaguchi Y., Kitahara Y., Kawaji S.—*Sol. State Comm.*, 1978, v. 14, p. 413.
97. Pepper M.—*J. de Phys.*, 1981, t. 42, Suppl. C-4, p. 17.
98. Fukuyama H.—*J. Phys. Soc. Japan*, 1980, v. 48, p. 2169.
99. Uren M. J., Davies R. A., Pepper M.—*J. Phys. Ser. C*, 1980, v. 13, p. L 985.
100. Pepper M.—*Phil. Mag. Ser. B*, 1978, v. 37, p. 83.
101. Houghton A., Jevicki A., Kenway R. D., Pruisken A. M. A.—*Phys. Rev. Lett.*, 1980, v. 45, p. 394.
102. Haydock R.—*Phil. Mag.*, 1981, v. 43, p. 203.
103. Richard J. L., Sarma G.—*J. de Phys.*, 1981, Suppl. C-4, t. 42, p. 37.
104. Richard J. L., Sarma G. Preprint.— 1981.
105. Pollak M.—*Disc. Farad. Soc.*, 1970, v. 50, p. 13.
106. Srinivasan G.—*Phys. Rev. Ser. B*, 1971, v. 4, p. 2581.
107. Knotek M. L., Pollak M.—*J. Non-Cryst. Sol.*, 1972, v. 8—10, с. 505; *Phys. Rev. Ser. B*, 1974, v. 9, p. 664; *Phil. Mag.*, 1977, v. 35, p. 117.
108. Efros A. L., Shklovskii B. I.—*J. Phys. Ser. C*, 1975, v. 8, p. L 49.
109. Kurosawa T., Sugimoto H.—*Progr. Theor. Phys. Suppl.*, 1975, v. 8, p. 234.
110. Mott N. F.—*Phil. Mag.*, 1976, v. 34, p. 643; *J. Phys. Ser. C*, 1975, v. 8, p. L 234.
111. Efros A. L.—*Ibid.*, 1976, v. 9, p. 2021.
112. Эфрос А. Л.— Цит. в <sup>80</sup> сб.— С. 126.
113. Бонч-Бруевич В. Л.— Вестн. Моск. ун-та. Сер. «Физика и астрономия», 1977, т. 18, № 3, с. 80.
114. Бонч-Бруевич В. Л.—*Ibid.*, № 4, с. 51.
115. Bonch-Bruевич V. L.—*Phys. Stat. Sol. Ser. b*, 1977, v. 84, p. 99.
116. Bonch-Bruевич V. L.— In: *Proc. of VII Intern. Conference on Amorphous and Liquid Semiconductors*/Ed. by W. E. Spear.— Edinburgh, 1977.— P. 239.
117. Гельмонт Б. Л., Эфрос А. А.— Письма ЖЭТФ, 1977, т. 25, с. 77.
118. Kirkpatrick S., Varma C. M.—*Sol. State Comm.*, 1978, v. 25, p. 821.
119. Pollak M., Knotek J.—*Sol. State Comm.*, 1977, v. 21, p. 183; *J. Non-Cryst. Sol.*, 1979, v. 32, p. 141.
120. Baranovskii S. D., Efros A. L., Gelmont S. L., Shklovskii B. I.—*J. Phys. Ser. C*, 1979, v. 12, p. 1023; *Sol. State Comm.*, 1978, v. 27, p. 1.

121. Efros A. L., Nguen van Lieu, Shklovskii B. I.— J. Phys. Ser. C, 1979, v. 12, p. 1869; Sol. State Comm., 1979, v. 32, p. 851.
122. Mott N. F.— J. Non-Cryst. Sol., 1979, v. 35—36, p. 79.
123. Pollak M.— Ibid., с. 83.
124. Mott N. F.— Phil. Mag., 1976, v. 34, p. 663.
125. Барановский С. Д., Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.— ЖЭТФ, 1980, т. 78, с. 395.
126. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.— ФТП, 1980, т. 14, с. 825.
127. Pollak M. Preprint.— 1981.
128. Бонч-Бруевич В. Л.— Acta Universitatis Wratislaviensis, 1968, Nr. 80, p. 29.
129. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Т. 1.— 3-е изд., дополненное Е. М. Лифшицем и Л. П. Питаевским.— М.: Наука, 1976.
130. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике.— М.: Физматгиз, 1961.
131. Hamilton E. M.— Phil. Mag., 1972, v. 26, p. 1043.
132. Шлимак И. С., Никулин Е. И.— Письма ЖЭТФ, 1977, т. 15, с. 595.
133. Kobayashi S., Monden Y., Sasaki W.— Sol. State Comm., 1979, v. 30, p. 161; 1980, v. 33, p. 793.
134. Ootuka Y., Komori P., Monden Y., Kobayashi S., Sasaki W.— Sol. State Comm., 1980, v. 33, p. 793.
- Castner T. G., Thomas G. A.— Comm. Sol. State Phys., 1980, v. 9, p. 235.
135. Bonch-Bruевич V. L., Mironov A. G., Zvyagin I. P.— Riv. Nuovo Cimento, 1973, v. 3, p. 321.
136. Барановский С. Д., Эфрос А. Л.— ФТП, 1980, т. 14, с. 2233.
137. Urbach F.— Phys. Rev., 1953, v. 92, p. 1324.
138. Kurik M. V.— Phys. Stat. Sol. Ser. a, 1971, v. 8, p. 9.
139. Pankove J. J.— Phys. Rev. Ser. A, 1965, v. 140, p. 2059.
140. Redfield D., Afromowitz M. A.— Appl. Phys. Lett., 1967, v. 11, p. 138.
141. Абрамович М. А., Редфилд Д.— В кн.: Труды IX Международной конференции по физике полупроводников.— Л.: Наука, 1968.— С. 103.
142. Wittman H. R.— Phys. Stat. Sol., 1969, v. 35, p. 863.
143. Davis E. A.— J. Non-Cryst. Sol., 1970, v. 4, p. 107.
144. Theye M. L.— Optics Comm., 1970, v. 2, p. 329; Mat. Res. Bull., 1971, v. 6, p. 103.
145. Pierce D. T., Spicer W. E.— Phys. Rev. Ser. B, 1972, v. 5, p. 3017.
146. Tsai C. C.— Ibid., 1979, v. 19, p. 2041.
147. Crandall R. S.— Phys. Rev. Lett., 1979, v. 44, p. 749; J. Non-Cryst. Sol., 1980, v. 35—36, p. 381.
148. Modell G., Anderson D. A., Paul W.— Phys. Rev. Ser. B, 1980, v. 22, p. 1918.
149. Moustakas T. D.— Sol. State. Comm., 1980, v. 35, p. 745.
150. Abeles B., Wronski C. R., Tiedje T., Cody G. D.— Ibid., 1980, v. 36, p. 537.
151. Tokumoto H., Tokumoto M., Ishiguro T.— J. Phys. Soc. Japan., 1981, v. 50, p. 602.
152. Zanzucchi P. J., Wronski C. R., Carlson D. E.— J. Appl. Phys., 1977, v. 48, p. 5227.
153. Tsai C. C., Fritzsche H.— Solar Energy Mater., 1979, v. 1, p. 1979.
154. а) Yamasaki S., Hata T., Yoshida T., Oheda H., Matsuda A., Okushi H., Tanaka K.— J. de Phys., 1981, t. 42, Suppl. C-4, p. 297.  
б) Yamasaki S., Nakagawa K., Yamamoto H., Matsuda A., Okushi H., Tanaka K. Preprint.— 1981.
155. Olivier M., Bouchut P.— J. de Phys., 1981, t. 42, Suppl. C-4, p. 305.
156. Gody G. D., Abeles B., Wronski C. R., Brooks B., Lafford W. A.— J. Non-Cryst. Sol., 1980, v. 35—36, p. 463.
157. Tauc J., Menthe A., Wood D. L.— Phys. Rev. Lett., 1970, v. 25, p. 749.
158. Street R. A., Searle T. M., Austin J. G., Sussmann R. S.— J. Phys. Ser. C, 1974, v. 7, p. 1582.
159. Андреев А. М., Герасименко В. С., Ляликова Р. Ю., Иову М. С., Минаев В. С., Радаудан С. И., Циуляну Д. И., Шугов С. Д.— Цит. в <sup>80</sup> сб.— С. 246.
160. Sussmann R. S., Austin J. G., Searle T. M.— Ibid.— С. 256.
161. Мазеп Т. Ф., Павлов С. И.— Ibid.— С. 260.
162. Henrion W., Friedrich H.— Ibid.— С. 269.
163. Закис Ю. Р., Москальонов А. В.— Ibid.— С. 327.

164. Коломиец Б. Т., Мазец Т. Ф., Эфендиев Ш. И.—ФТП, 1970, т. 4, с. 1103.
165. Коломиец Б. Т., Мазец Т. Ф., Павлов С. И., Сарсембинов Ш. Ш.—ФТП, 1975, т. 9, с. 720.
166. Kolomiets B. T., Mazets T. F., Sarsembinov Sh. Sh., Efendiev Sh. K.—J. Non-Cryst. Sol., 1972, v. 8—10, p. 1010.
167. Сарсембинов Ш. Ш., Есенбаев М. Г., Рожахметова Г. К.—Изв. АН Каз. ССР. Сер. физ., мат., 1976, № 4, с. 50.
168. Сарсембинов Ш. Ш., Корсунский М. И., Есенбаев М. Г.—Изв. АН Каз. ССР. Сер. физ., мат., 1977, № 2, с. 48.
169. Edmond J. T., Patel V.—Цит. в <sup>116</sup> сб.—Р. 551.
170. Moridi G. R., Hogarth C. A.—Ibid.—Р. 688.
171. Барамидзе Н. В., Курдиани Н. И.—ФТП, 1971, т. 5, с. 631.
172. Барамидзе Н. В., Курдиани Н. И.—В кн.: Радиационная физика неметаллических кристаллов.—Киев: Наукова Думка, 1971.—Т. III, ч. 2, с. 32.
173. Griffith R. W.—Цит. в <sup>116</sup> сб.—Р. 457.
174. Davudov A. S.—Phys. Stat. Sol., 1968, v. 27, p. 51.
175. Lubchenko A. K., Zushman I. M.—Ibid., 1969, v. 32, p. 703.
176. Пекар С. И. Исследования по электронной теории ионных кристаллов.—М.: Гостехиздат, 1952.
177. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников.—М.: Наука, 1979.
178. Бонч-Бруевич В. Л., Сульженко П. С.—Вестн. Моск. ун-та. Сер. «Физика и астрономия», 1982, т. 23, с. 37.
179. Сульженко П. С.—Ibid., с. 82. Деп. ВИНТИ № 4858 от 22.10.81, г.
180. Baramidze N. V., Bonch-Bruевич V. L., Giorgadze M. P., Kurdiani N. I.—Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1982, v. 110, p. 33.
181. Барамидзе Н. В., Бонч-Бруевич В. Л., Курдиани Н. И.—Сообщения АН ГССР, 1983.
182. Искра В. Д.—ЖЭТФ, 1982, т. 82, с. 646; Изв. вузов. Сер. «Физика», 1982, т. 25, № 11, с. 32.
183. Esser B., Kleinert P.—Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1975, v. 72, p. 535.
184. Shuji Abe.—J. Phys. Soc. Japan, 1980, v. 49, Suppl. A, p. 1179.
185. Shuji Abe, Yutaka Toyazawa.—Techn. Rept. I.C.S.P. Ser. A, 1981, No. 1124.
186. Esser—Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1973, v. 55, p. 503; v. 58, p. 149.
187. Esser B., Kleinert P.—In: Proc. of the Conference on Amorphous Semiconductors' 76.—Budapest, 1976.—Р. 83.  
Esser B., Kleinert P.—Цит. в <sup>116</sup> сб.—Р. 244.
188. Esser B., Keiper R., Sprenger D.—In: Proc. of the Conference on Amorphous Semiconductors' 78.—Prage, 1978.—Р. 517.
189. Искра В. Д.—Изв. вузов. Сер. «Физика», 1979, № 12, с. 37; 1980, № 3, с. 39.
190. Iskra V. D.—Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1979, v. 96, p. 843; 1981, v. 106, p. 627.
191. Van Cong H.—J. Phys. and Chem. Sol., 1975, v. 36, p. 1237.
192. Перлин Ю. Е.—УФН, 1963, т. 80, с. 553.
193. Knights J.—J. Non-Cryst. Sol., 1980, v. 35—36, p. 159.
194. Reimer J. A., Vaughan R. W., Knights J.—Phys. Rev. Lett., v. 44, p. 193.
195. Fritzsche H.—In: Fundamental Physics of Amorphous Semiconductors: Proc. of the Kyoto Summer Institute. Kyoto, Japan, September 8—11, 1980/Ed. by F. Yonezawa.—Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1981.—Р. 1.
196. Paul W.—Ibid.—Р. 72.
197. Brodsky M. H.—Ibid.—Р. 56; Sol. State Comm., 1980, v. 36, p. 55.
198. Le Comber P. G., Spear W. E.—Topics in Appl. Phys., 1979, v. 36, p. 251.
199. Lucovsky G.—Цит. в <sup>195</sup> сб.: —Р. 87.
200. Бонч-Бруевич В. Л., Миронов А. Г.—Опт. и спектр., 1983.
201. Mironov A. G.—Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1980, v. 101, p. 613.
202. Гершензон Е. М., Ильин В. А., Куриленко И. Н., Литвак-Горская Л. Б., Рабинович Р. И., Филонович С. Р.—В кн.: Труды VI Международной конференции по аморфным и жидким полупроводникам: Электронные состояния в некристаллических полупроводниках.—Л.: Наука, 1976.—С. 338.
203. Thouless D. J.—Phys. Rev. Lett., 1977, v. 39, p. 1167.
204. Perrier M.—Proc. Roy. Soc. Ser. A, 1971, v. 353, p. 225.
205. Звягин И. П.—Phil. Mag., 1983.
206. Иоселевич А. С.—ЖЭТФ, 1982, т. 81, с. 1508.
207. Перель В. И., Ясевич И. Н.—ФТТ, 1983.
208. McMillan W. L.—Phys. Rev. Ser. B, 1981, v. 24, p. 2739.

- 209. Shapiro B., Abrahams E.—Ibid., p. 4889.
- 210. Tauc G., Grigorovici R., Vancu A.—Phys. Stat. Sol., 1966, v. 15, p. 627.
- 211. Cody G. D., Tiedje T., Abeles B., Brooks B., Goldstein Y.—Phys. Rev. Lett., 1981, v. 47, p. 1480.
- 212. Cody G. D., Tiedje T., Abeles B., Moustakas T. D., Brooks B., Goldstein Y.—J. de Phys., 1981, t. 42, Suppl. C-4, p. 301.
- 213. Robert I. L., Pistoulet B., Raymond A., Aulombard R. L., Bernard C., Bousquet C.—Rev. de Phys. Appl., 1978, v. 13, p. 246.
- 214. Воронков В. В., Воронкова Г. А., Зубов Б. В., Калинушкин В. В., Крылецкий Б. Б., Мурина Т. М., Прохоров А. М.—ФТТ, 1977, т. 19, с. 1784.
- 215. Жуматий П. Г.—Цит. в <sup>202</sup> сб.—С. 111.
- 216. Жуматий П. Г.—Вестн. Моск. ун-та. Сер. «Физика и астрономия», 1979, т. 17, с. 436.
- 217. Zhumatii P. G.—Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1975, v. 75, p. 61.